



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

INSTITUTO DE FÍSICA

**ESTUDIO DE UN GAS DE FERMÍ CON INTERACCIÓN A TRAVÉS DE UN
POTENCIAL FINITO, CRUCE BCS-BEC.**

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

M. en C. Eleazar Neri Medina

TUTOR O TUTORES PRINCIPALES:

Dra. Rosario Paredes Gutiérrez, Instituto de Física

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR:

Dr. Víctor Manuel Romero Rochín, Instituto de Física
Dr. José Ignacio Jiménez Mier y Terán, Instituto de Ciencias
Nucleares.

Ciudad de México, enero 2021



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.

Datos del Jurado

Dra. Rosario Paredes Gutiérrez

Instituto de Física

Universidad Nacional Autónoma de México

Dr. Luis Agustín Olivares Quiroz

Academia de Física y Posgrado en Ciencias de la Complejidad

Universidad Autónoma de la Ciudad de México

Dra. Gabriela Murguía Romero

Facultad de Ciencias

Universidad Nacional Autónoma de México

Dr. Luis Antonio Pérez López

Instituto de Física

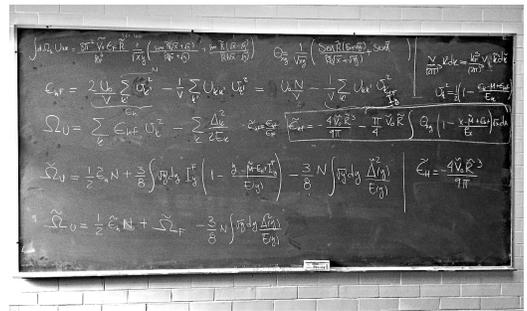
Universidad Nacional Autónoma de México

Dr. Carlos Villarreal Luján

Instituto de Física

Universidad Nacional Autónoma de México

Agradecimientos



Mis más profundo agradecimiento a la **Dra. Rosario Paredes** y al **Dr. Víctor Romero** por creer en mi, agradezco su paciencia y la oportunidad que más de una vez me han brindado, los aprecio ... Infinitas Gracias ∞ .

Agradezco al **Dr. Santiago Caballero** por su tiempo y ayuda al resolver muchos de los problemas que fueron surgiendo durante el desarrollo de este trabajo; agradezco al **Comité Tutor** que me apoyo en el posgrado, así como al **Jurado** por su tiempo y haber accedido a revisar este trabajo.

Agradezco al **CONACYT** que a través del Programa de Becas para Estudios de Posgrado puede mantenerme durante mis estudios del posgrado: maestría beca número: 31715 y doctorado beca número: 369549; asimismo agradezco a la UNAM que por medio del Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica DGAPA-PAPIIT: “**Materia cuántica ultrafría: superfluidez, Turbulencia y Estados Localizados**”, clave: **IN105217**, fue financiado el término de este trabajo; a la sociedad mexicana por haber financiado mis estudios, ¡gracias!

Le doy gracias a la **UNAM**, a la **Facultad de Ciencias**, al **Instituto de Física** y al **Posgrado en Ciencias Físicas** el haberme formado. Mi reconocimiento a las instituciones educativas de este país que ofrecen una educación gratuita en todos los niveles educativos permitiendo que cualquier persona pueda acceder a una educación y gracias a la cual he podido llegar al más alto nivel académico.

A mis padres †,
para Yanet y Ulises

"... Dios me libre de completar nada. Este libro entero no es más que un Borrador; mejor dicho, el Borrador de un Borrador.
¡Ah, Tiempo, Energía, Dinero y Paciencia!"

Moby Dick, Herman Melville

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

Micromegas, Voltaire

Resumiendo: para detenerme en t_0 debo establecer una configuración OBJETIVA de t_0 ; para establecer una configuración OBJETIVA de t_0 debo desplazarme a t_1 ; para desplazarme a t_1 debo adoptar una perspectiva SUBJETIVA cualquiera, por lo tanto da lo mismo que tenga la mía. Resumiendo una vez más: para detenerme en el tiempo debo moverme con el tiempo, para llegar a ser OBJETIVO debo mantenerme SUBJETIVO."

Tiempo Cero, Italo Calvino

Índice general

Datos del Jurado	I
Agradecimientos	III
Resumen	IX
Abstract	XI
I Antecedentes	1
1. Introducción.	3
2. Crossover BCS-BEC, potencial de contacto.	9
2.1. Fenómeno del crossover, potencial de contacto.	9
2.2. Termodinámica a temperatura cero ($T = 0$).	13
2.3. Variable de contacto.	17
2.4. Funciones de pares.	18
3. Resultados y técnicas experimentales en gases atómicos.	21
3.1. Confinamiento magnético.	22
3.2. Enfriamiento láser y evaporativo	24
3.3. Resonancias de Feshbach	27
II Fundamentos	33
4. Interacción entre partículas.	35
4.1. Sistema de dos partículas.	35
4.2. Ecuación radial, corrimientos de fase.	36
4.3. Límite de bajas energías, longitud de dispersión.	41
4.4. Desarrollo en ondas parciales.	42

4.5. Amplitud de dispersión, matriz T .	44
4.6. Potenciales de interacción modelo.	48
4.7. Longitud de dispersión, potenciales modelo.	50
5. Gas de Fermi con interacción.	57
5.1. Gas ideal de Fermi en dos estados de espín.	58
5.2. Hamiltoniano de un gas de Fermi con interacción.	61
5.3. Transformación de Bogoliubov-Valatin.	64
5.4. Modelo con potencial de contacto.	68
5.5. Expresiones en el límite termodinámico.	71
III Resultados	73
6. Crossover potencial finito, termodinámica.	75
6.1. Relaciones termodinámicas.	75
6.2. Sistema de ecuaciones integrales, energías.	77
6.3. Crossover, potencial de interacción finito.	81
6.4. Termodinámica con potencial finito.	85
6.5. Estructura del gap $\Delta(k)$.	100
6.6. Variable de contacto, potencial de interacción finito.	102
7. Funciones de pares.	107
7.1. Pares de Cooper.	107
7.2. Estado BCS.	111
7.3. Función de pares, crossover.	113
8. Conclusiones.	125
IV Apéndices	127
A. Transformación de Bogoliubov-Valatin.	129
A.1. Hamiltoniano de un gas de Fermi con interacción.	129
A.2. Energía de Hartree, de Fock y de pares.	132
A.3. Transformación de Bogoliubov-Valatin.	134
A.4. Diagonalización.	137
B. Dimensiones de Fermi.	143
Bibliografía	147
Artículo publicado	151

RESUMEN

En las últimas décadas se ha venido realizando una intensa investigación en el área de los gases atómicos ultrafríos, tanto en el ámbito experimental como teórico. En los gases de Fermi el *crossover BCS-BEC*, que describe la transición de un estado tipo BCS de pares de Cooper a un estado BEC (Condensado de Bose-Einstein) de estados moleculares en un gas de fermiones en dos estados de espín modificando la longitud de dispersión, representa uno de los fenómenos de mayor interés debido a que es resultado de las propiedades de interacción entre partículas.

En este trabajo se aborda el *crossover BCS-BEC* con un gas de Fermi interactuante en dos estados de espín diferentes modelando la interacción entre partículas con diferentes potenciales centrales atractivos: pozo de potencial, potencial exponencial (Rarita), potencial de Yukawa, potencial tipo van der Waals (r^{-6}) y potencial dipolar (r^{-3}), estos dos últimos incluyendo una barrera finita. Los potenciales de interacción empleados tienen como parámetros una alcance R y una profundidad V_0 de tal manera que hay una relación entre estos parámetros y la longitud de dispersión para cada uno de ellos: $a = a(R, V_0)$.

El marco teórico para estudiar el gas de Fermi es la teoría BCS suponiendo un potencial de interacción entre partículas como los descritos anteriormente y que conlleva a un sistema de ecuaciones integrales que tiene como parámetros: R y V_0 . Al resolver numéricamente estas ecuaciones y teniendo la relación entre estos parámetros y la longitud de dispersión se describe el *crossover* en el gas de Fermi. Se analizan las propiedades termodinámicas y las funciones de pares de fermiones.

Esta tesis está dividida en tres partes; la primera parte contiene los antecedentes generales del *crossover BCS-BEC* tal como ha sido descrito teóricamente, principalmente en el trabajo de Leggett, mediante el uso de la longitud de dispersión. Se incluye además una breve revisión de los logros experimentales en el contexto de los gases atómicos ultrafríos así como las técnicas empleadas para alcanzar temperaturas del orden de nano Kelvin. Esta parte de la tesis sirve de introducción y motivación del presente trabajo. La segunda parte de esta tesis contiene los fundamentos teóricos empleados para abordar el gas de fermiones interactuantes, se presenta una breve revisión de la dispersión cuántica de dos cuerpos y la teoría BCS que permite resolver el Hamiltoniano de un sistema de fermiones con interacción empleando la transformación de Bogoliubov-Valantin. Finalmente, la tercera parte contiene la descripción del modelo empleado en este trabajo para abordar el *crossover* mediante un potencial de interacción así como los resultados y sus conclusiones.

ABSTRACT

In the last decades intense research has been carried out in the area of ultracold atomic gases, both in the experimental and theoretical fields. In Fermi gases the *BCS-BEC crossover*, which describes the transition from a BCS-type state of Cooper pairs to a BEC (Bose-Einstein condensate) state of molecular states in a fermion gas in two spin states by modifying the dispersion length, represents one of the phenomena of greatest interest because it is the result of the interaction properties between particles.

In this work, the BCS-BEC crossover is approached with an interacting Fermi gas in two different spin states, modeling the interaction between particles with a different attractive central potentials: the spherical well potential, the exponential potential (Rarita), the Yukawa potential, the van der Waals potential (r^{-6}) and the dipole potential (r^{-3}), the latter two including a finite barrier. The interaction potentials employed have as parameters a range R and a depth V_0 in such a way that there is a relationship between these parameters and the scattering length for each of them: $a = a(R, V_0)$.

The theoretical framework to study the Fermi gas is the BCS theory, assuming an interaction potential between particles such as those described above and that leads to a system of integral equations that has as parameters: R and V_0 . By solving these equations numerically and having the relationship between these parameters and the scattering length, the crossover in the Fermi gas is described. The thermodynamic properties and the functions of fermions pairs are analyzed.

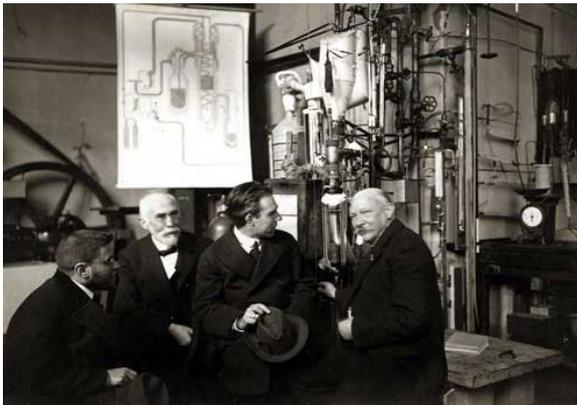
This thesis is divided into three parts; the first part contains the general background of the BCS-BEC crossover as it has been theoretically described, mainly in Leggett's work, by using the dispersion length. It also includes a brief review of the experimental achievements in the context of ultracold atomic gases as well as the techniques used to reach temperatures of the order of nano Kelvin. This part of the thesis serves as an introduction and motivation for this work. The second part of this thesis contains the theoretical foundations used to approach the interacting fermions gas, a brief review of the quantum dispersion of two bodies and the BCS theory is presented that allows to solve the Hamiltonian of a fermions system with interaction using the transformation by Bogoliubov-Valantin. Finally, the third part contains the description of the model used in this work to approach the crossover through an interaction potential as well as the results and its conclusions.

Parte I
Antecedentes

CAPÍTULO 1

Introducción.

Uno de los fenómenos más evidentes en la naturaleza y que siempre han llamado la atención en la física teórica y experimental son los diferentes estados en las cuales se presenta la materia así como sus cambios o transformaciones de un estado a otro. Desde que se comenzaron a estudiar estos fenómenos se sabe que estas transformaciones dependen de las condiciones externas como la temperatura, presión, etc. Estos cambios pueden ser repentinos y por lo tanto más evidentes - de todos es conocido la transición de fase que sufre el agua al modificar su temperatura y presión- las investigaciones tanto teórica como experimental han destacado también que los cambios en los estados de la materia pueden ocurrir dependiendo de las propiedades del sistema, por poner un ejemplo: un gas ideal de bosones tiene una transición al condensado de Bose-Einstein válida en tres dimensiones cuando el gas esta confinado en un potencial externo homogéneo, sin embargo esto puede cambiar al confinar el gas en diferentes configuraciones de potenciales. Este ejemplo del gas ideal de bosones tiene una peculiaridad importante ya que no considera la interacción entre partículas.



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

En el campo de los *fluidos cuánticos*, entendiéndose por ello los fluidos en condiciones de muy bajas temperaturas tal que los efectos de la estadística cuántica de origen microscópico se manifiestan a nivel macroscópico en las propiedades termodinámicas del sistema, hay dos fenómenos que desde su descubrimiento han impulsado la investigación teórica y experimental: la superfluidez y la superconductividad. Ambos fenómenos fueron descubiertos de manera experimental, Kamerlingh Onnes descubre en 1911 la superconductividad y Piotr Kapitza la superfluidez en 1937 [Kapitza, 1938], en el contexto de los trabajos

experimentales del Helio líquido. Desde los experimentos de Onnes y Kapitza nuevos fenómenos

han surgido: la superconductividad de alta temperatura, la superfluidez en baja dimensionalidad y en redes ópticas, la turbulencia en superfluidos (cuántica), por mencionar algunos; todos estos fenómenos ha motivando un intenso trabajo de investigación teórica.

Desde un punto de vista teórico se ha logrado entender que las propiedades principales de los fenómenos mencionados arriba se deben al carácter individual de las partículas que conforman los sistemas, es decir si las partículas son bosones o fermiones, las primeras no satisfacen el principio de exclusión de Pauli, las segundas sí lo satisfacen. Es entendible que esta propiedad intrínseca de las partículas se manifieste en las propiedades colectivas de los sistemas y ha sido un gran logro de la física. Sin embargo un elemento tan importante como el carácter individual de las partículas es la interacción entre ellas y este aspecto ha sido un desafío a la física teórica.

Para los sistemas de fermiones uno de los fenómenos cuánticos más importantes es la superconductividad, mientras que para los gases de bosones es la superfluidez y aunque ambos fenómenos se presentan con diferente tipo de partículas la posibilidad de que pares de fermiones (espín semientero) formen un bosón (espín entero) permite una transición de un estado superconductor a condensado de Bose-Einstein. Esta propiedad en un gas de fermiones se le conoce como *crossover BCS-BEC* y desde 2004 se ha logrado obtener esta transición gases alcalinos [C. A. Reagal and Jin, 2004], [Zwierlein et al., 2004], etc.



Figura 1.1: Ganadores del premio Nobel 1972 por desarrollar la teoría de superconductividad BCS, de izquierda a derecha: John Bardeen, Leon N. Cooper, John R. Schrieffer.

La **superconductividad**, observada por primera vez en mercurio, fue descubierta por Kamerlingh Onnes al detectar una caída abrupta de la resistencia eléctrica de dicho material al ser enfriado por debajo de 4 K, cuando lo que se esperaba era una disminución gradual en la resistencia al acercarse al cero absoluto. La superconductividad, se sabe, ocurre en variedad de materiales incluyendo elementos simples como el estaño y el aluminio, así como en diversas aleaciones metálicas y algunos semiconductores fuertemente dopados. La teoría de superconductividad convencional o BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) [Bardeen et al., 1957] fue desarrollada en la década de los 50's del siglo XX para explicar el fenómeno de superconductividad y mereció a los autores el premio Nobel del año 1972. La idea básica de esta teoría es que un par de electrones -en general fermiones- que interactúan atractivamente en presencia del *mar de*

Fermi (fermiones ideales) producen un estado ligado con energía negativa respecto a la energía de Fermi. Esta idea fue propuesta por Cooper [Cooper, 1956] y establece que de manera general para un sistema de fermiones que interactúan atractivamente, el estado más estable -de menor energía- corresponde aquél donde los fermiones forman estados ligados de pares: “*pares de Cooper*”, dicho estado se le conoce como *estado o régimen BCS*. Los pares de Cooper tienen varias propiedades, por ejemplo, su momento de centro de masa es nulo, los fermiones que lo componen tienen estado de espín opuesto, el “tamaño” de los pares es mucho mayor a la distancia media entre partículas, etc. También es de resaltar que la interacción atractiva entre las partículas en el estado BCS puede ser tan débil como sea posible y aún así formar pares de Cooper, a diferencia de un estado ligado molecular en el cual se requiere un umbral de energía para que se produzca el estado ligado. Aunque esta idea inicialmente fue desarrollada para sistemas de electrones (conductores) su validez para sistemas atómicos en gases de Fermi ha sido probada [Bruun et al., 1999].

Por otra parte, el descubrimiento del fenómeno de **superfluidez** en ^4He líquido se debe al físico ruso Piotr Kapitsa. Este fenómeno se observó al bajar la temperatura del Helio por debajo de su punto de ebullición, alrededor de 2 K. Un superfluido es un fluido caracterizado por la ausencia total de viscosidad. El *modelo de dos fluidos* propuesto por Landau describe el estado superfluido en términos de dos fluidos con propiedades diferentes: una de las componentes se mueve sin viscosidad, mientras que la otra es un líquido viscoso ordinario, este modelo fenomenológico explica varias de las propiedades observadas en los superfluidos. Sin embargo, una de las primeras ideas formales por tratar de entender la superfluidez fue considerar este fenómeno como un condensado de Bose-Einstein (BEC), los átomos de ^4He son bosones, sin embargo en un condensado BEC las partículas son ideales -sin interacción- y por lo tanto la relación de dispersión no satisface el *criterio de Landau* que determina el estado de superfluidez en un líquido, más aun las interacciones juegan un papel relevante en la superfluidez. Una de las características observadas en un superfluido es la presencia de vórtices cuando es sometido a rotaciones, dicha propiedad se explica a través de la ecuación de Gross-Pitaevskii que introduce la interacción entre partículas.



Anthony Leggett.

En el año 1950 fue descubierta la superfluidez en el ^3He a una temperatura próxima a los 4.2 K. Este hecho fue relevante ya que el ^3He a diferencia del ^4He es un fermión y en ese momento la superfluidez se entendía como un fenómeno de interacción entre bosones, más tarde se observaron propiedades similares al estado superconductor en el ^4He . Ahora sabemos que el fenómeno de superfluidez es una propiedad común a los sistemas de fermiones o bosones con interacción. En 2003 Anthony Leggett recibe el premio Nobel por su trabajo teórico de la superfluidez en el ^3He , que a grandes rasgos, consiste en una extensión de la teoría BCS donde los pares de Cooper tienen momento angular diferente de cero y ciertos grados de libertad adicionales [Leggett, 2004]. En la ruta por resolver el problema de la superfluidez en el ^3He , en el año 1980 Leggett escribe un artículo fundamental en la teoría del crossover BEC-BEC [Leggett, 1980] en el que describe un gas

de Fermi donde al variar la longitud de dispersión de las partículas es posible pasar de un estado BCS donde los fermiones forman pares de Cooper cuando la longitud de dispersión es negativa ($a < 0$) y la interacción es débil, a un estado BEC donde pares de fermiones forman dímeros cuando la longitud de dispersión es positiva ($a > 0$). Aunque algunas ideas sobre esta propiedad en un gas de Fermi ya había sido sugerida por Eagles [Eagles, 1969] y Schafroth-Blatt [Schafroth MR, 1957].

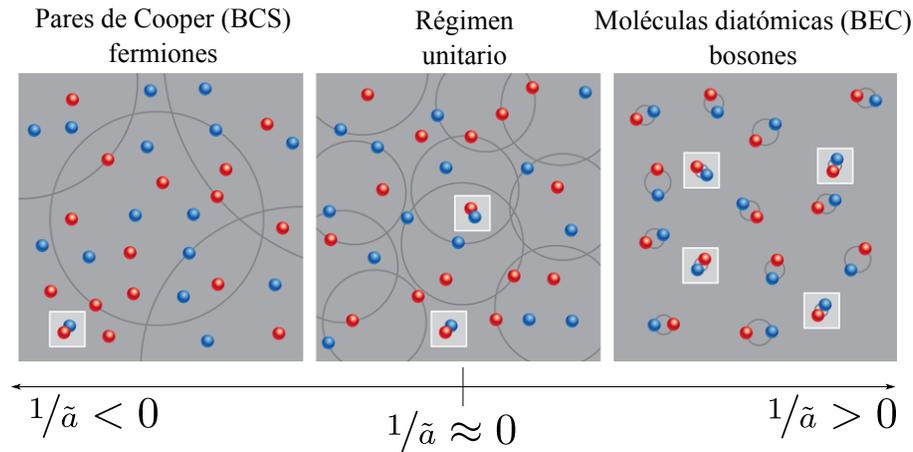


Figura 1.2: Imagen descriptiva del crossover BCS-BEC [Braaten, 2009]: **a)** En el régimen BEC todos los átomos forman moléculas (bosón) diatómicas a partir de dos fermiones con espín opuesto; **b)** en el régimen unitario hay una mezcla de moléculas diatómicas y pares de Cooper; **c)** en el régimen BCS los átomos forman pares de Cooper.

En el modelo de Leggett del crossover la interacción entre las partículas del gas de Fermi está descrita por la longitud de dispersión, este parámetro surge del análisis de dispersión entre dos cuerpos en la aproximación de bajas energías. Esta aproximación tiene como consecuencia una divergencia en la ecuación del gap (resultado de la teoría BCS) pero que puede ser “anulada” mediante una técnica de *renormalización*.

En el año 2003 se logró generar un condensado de Bose-Einstein a partir de un gas de fermiones en dos estados de espín diferente [Greiner et al., 2003], posteriormente diversos grupos experimentales consiguieron el mismo resultado con diferentes gases. En 2005 el grupo del MIT liderado por Wolfgang Ketterle [Zwierlein et al., 2005] logró observar una red de vórtices en un gas de ${}^6\text{Li}$ al variar la longitud de dispersión. Este fue un resultado importante ya que puso de manifiesto la propiedad de superfluidez del gas en ambos regímenes, BCS y BEC.

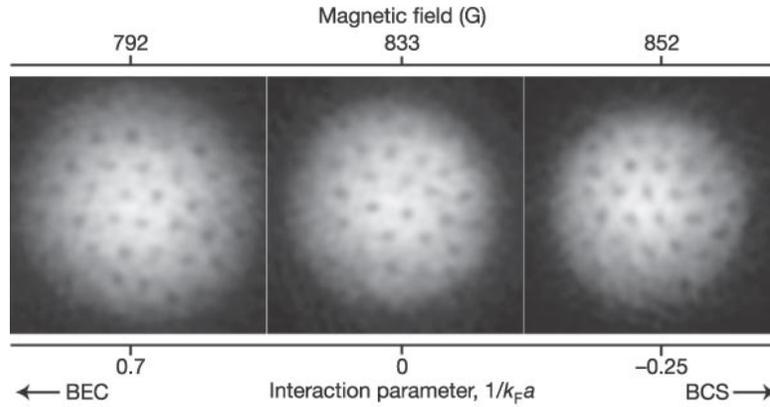


Figura 1.3: Red de vórtices observados en un gas de ${}^6\text{Li}$ [Zwierlein et al., 2005], evidencia del estado superfluido en un gas de Fermi en ambos estados BCS, BEC.

Motivado por el fenómeno del crossover BCS-BEC, el objetivo de este trabajo es estudiar un gas de fermiones modelando la interacción a través de diferentes potenciales. Consideramos tres potenciales atractivos: pozo de potencial, potencial exponencial o de Rarita y potencial de Yukawa; por otra parte, con el fin de modelar la estructura más real de potenciales atómicos, se consideramos dos potenciales que tienen una parte atractiva y una parte repulsiva: la parte repulsiva se modela con una barrera de altura finita y la parte atractiva se modela de dos maneras: con un potencial dipolar ($1/r^3$) y un potencial van der Waals ($1/r^6$). La estructura general de estos potenciales modelo depende de dos parámetros: una “profundidad” V_0 y un “alcance” R y en el capítulo 4 se describen más a detalle estos potenciales. Para comparar esta descripción de interacción entre partículas con los resultados del crossover donde la interacción está descrita con la longitud de dispersión se hace uso de la relación entre la longitud de dispersión y los parámetros del potencial lo cual es posible para los potenciales de interacción estudiados. Se presentará un estudio detallado de la dependencia de los parámetros V_0 , R y su impacto en la termodinámica de un gas de Fermi y en la generación de estados de pares de partícula.

CAPÍTULO 2

Crossover BCS-BEC, potencial de contacto.

Continuación se hace una breve revisión del modelo del crossover BCS-BEC para partículas que interactúan a través de un *potencial de contacto*. En un trabajo de Eagles de 1969 [Eagles, 1969] ya se establece la posibilidad de modificar la interacción entre partículas en el contexto de la superconductividad en semiconductores al variar la concentración de los portadores de carga; sin embargo, se debe a Leggett en un trabajo de 1980 [Leggett, 1980] quien describe lo que actualmente se conoce como crossover BCS-BEC en un gas de Fermi donde la interacción entre partículas está caracterizada por la longitud de dispersión, misma que varía continuamente y permite pasar de un estado fermiónico de pares de Cooper (BCS) a un estado de pares “moleculares” en condensado de Bose-Einstein (BEC). El trabajo de Leggett, que hasta la fecha sigue siendo el referente al abordar el fenómeno del crossover, hace un análisis a del estado base (temperatura cero) pero años más tarde se realizaron trabajos incluyendo los efectos de temperatura [Nozières and Schmitt-Rink, 1985] [Sá de Melo et al., 1993]. Aquí se hace una descripción de este modelo del crossover y algunos de sus principales resultados, se hace énfasis en las propiedades termodinámicas y las funciones de pares mismas que se analizan después modelando la interacción con diferentes potenciales.

2.1. Fenómeno del crossover, potencial de contacto.

Consideremos un gas de fermiones en dos estados de espín $\{\uparrow, \downarrow\}$ en la misma concentración, es decir que hay el mismo número de partículas en cada estado. En la aproximación de campo medio el Hamiltoniano de un gas de fermiones que interactúan en el formalismo de segunda cuantización se escribe como¹:

¹En el capítulo 5 se describe a detalle el hamiltoniano de un gas de Fermi con interacción.

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}}) + \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} , \quad (2.1)$$

donde: $\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (m es la masa de las partículas del gas), son los estados de energía de partícula libre: y $\hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \equiv \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}$ corresponde al operador de número definido a partir de los operadores aniquilación y creación $\{\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger\}$ en el espacio de Fock del estado $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$; donde \mathbf{k} representa el momento de la partícula y σ su estado de espín ($\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$). Por otra parte U_0 corresponde a la transformada de Fourier del potencial de interacción entre partículas, $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \equiv \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} U(r) d^3r$, evaluada en cero: $U_0 = U(\mathbf{k} = \mathbf{k}' = 0)$, esta es una aproximación de campo medio y asociada también al empleo de un potencial de contacto. Es importante notar que la interacción entre partículas se introduce en el hamiltoniano a través del parámetro U_0 .

El modelo teórico del crossover tiene dos ideas fundamentales, una de ellas la teoría BCS de superconductividad [Bardeen et al., 1957] que permite encontrar el estado base del hamiltoniano (2.1) con un método variacional o diagonalizar el mismo a través de una transformación de Bogoliubov-Valatin [Alexander L. Fetter, 1971], la otra es emplear la longitud de dispersión para describir la interacción entre partículas, de esta manera el inverso de la longitud de dispersión es una variable más del sistema que varía de manera continua tomando valores negativos, positivos e incluso cero. Como es costumbre en sistema de muchas partículas, lo más conveniente es cambiar al ensamble gran canónico: $\hat{\Omega} \equiv \hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N}$, donde μ es el potencial químico y \hat{N} el operador de número de partículas, empleando la transformación de Bogoliubov-Valatin²:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \\ \hat{a}_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow} + v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, \end{aligned} \quad (2.2)$$

donde $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ son parámetros que sirven para diagonalizar el hamiltoniano (2.1). La condición necesaria sobre los parámetros $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ para que (2.1) sea diagonal se determina por las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} (1 + x_{\mathbf{k}}) \\ v_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} (1 - x_{\mathbf{k}}) \end{aligned}, \quad \text{donde: } x_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{E_{\mathbf{k}}}, \quad E_{\mathbf{k}} \equiv \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}, \quad (2.3)$$

y el gap Δ se calcula a partir de la siguiente ecuación implícita:

$$\Delta = -\frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \tan\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right). \quad (2.4)$$

²El método de Bogoliubov-Valatin es equivalente a temperatura cero al método variacional empleando la función BCS, aquí se presenta el método de Bogoliubov-Valatin.

donde $\beta \equiv 1/k_B T$ (k_B es la constante de Boltzmann). Sustituyendo en el hamiltoniano (2.1) se obtiene el siguiente resultado [Parish, 2015]:

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) + \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \quad (2.5)$$

que también se puede expresar de la siguiente manera:

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \left[\langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle + \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle \right] + \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - E_{\mathbf{k}}) - \frac{V}{U_0} \Delta^2, \quad (2.6)$$

donde: $\hat{m}_{\pm\mathbf{k}} \equiv \hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}$, corresponden a los operadores de número en la nueva representación de cuasipartículas definidas por los operadores (2.2) y cuya relación de dispersión esta dada por: $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}$. Los operadores de número $\hat{m}_{\pm\mathbf{k}}$ satisfacen la distribución de Fermi-Dirac (con potencial químico cero):

$$\langle \hat{m}_{\pm\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}}}. \quad (2.7)$$

El gap Δ es un parámetro relevante que resulta de la teoría BCS y cuyo significado físico fue explicado por Bardeen [Bardeen et al., 1957] al analizar en el espacio de momentos la posibilidad de un estado ligado entre pares de fermiones que interactúan débilmente y con energías cercanas a la energía de Fermi, el gap es precisamente la energía del estado ligado de pares de partículas que corresponde a los pares de Cooper. Así, el estado más estable de un sistema de fermiones que interactúan débilmente es aquel donde los fermiones forman pares de Cooper. En un gas el estado formado por pares de Cooper tiene las propiedades de un superfluido donde además el gap es el parámetro de orden que define la transición de liquido normal de Fermi al estado superfluido.

La ecuación (2.4) conocida como *ecuación del gap* en la aproximación donde el gap es constante es una ecuación implícita³, sin embargo tal aproximación conduce a que la ecuación del gap tenga una divergencia que puede ser “removida” introduciendo un término adicional también divergente que la anule la primera. Esto se logra analizando la dispersión de un par de partículas a través de la amplitud de dispersión, que por una parte, en el límite de bajas energías, es igual a la longitud de dispersión a y por otra parte se puede desarrollar como una serie en términos de la transformada de Fourier $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ (en el capítulo 4 se analiza con más detalle la teoría de dispersión de pares de partículas). Ambos resultados, conducen a la siguiente *ecuación de renormalización* [Leggett, 1980], [Parish, 2014], [Bruun et al., 1999]:

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \frac{1}{U_0} + \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (2.8)$$

³En general la ecuación del gap se trata de una ecuación integral, ver sección

El término U_0 de esta expresión se debe sustituir en la ecuación del gap (2.4) y el gran potencial (2.6) para evitar las divergencias en ambas expresiones. Es importante decir que al trabajar en ensamble gran canónico se tiene la siguiente relación entre el potencial químico μ y el número de partículas del gas:

$$\langle \hat{N} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left[1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right]. \quad (2.9)$$

En el límite termodinámica la ecuación del gap (con término de renormalización) y la ecuación del número de partículas se expresan como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dx \sqrt{x} \left[\frac{1}{x} - \frac{1}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right] &= \frac{1}{\tilde{a}}, \\ \frac{3}{4} \int_0^{\infty} dx \sqrt{x} \left[1 - \frac{(x - \tilde{\mu})}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh \left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right] &= 1, \end{aligned} \quad (2.10)$$

La tilde en las diferentes variables significa que tienen unidades de Fermi: $\tilde{\Delta} = \Delta/\epsilon_F$, $\tilde{\mu} = \mu/\epsilon_F$, donde la energía de Fermi está dada por: $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m)$, siendo m la masa de las partículas del gas. La variable de integración es: $x = k/k_F$, siendo k el vector de momento y $k_F = 3\pi^2 N/V$, donde N/V es la densidad de partículas del gas.

El fenómeno del crossover BEC-BEC consiste en la posibilidad de modificar externamente la longitud de dispersión en el gas de fermiones y con ello modificar las propiedades del gas tanto desde un punto de vista microscópico así como de sus propiedades termodinámicas. El par de ecuaciones (2.10) es la base teórica del crossover y los resultados generales que se obtienen corresponde a dos límites o regímenes bien definidos y que se discuten a continuación. De manera conveniente se elige al inverso de la longitud de dispersión, que en adelante se denota como $\tilde{\eta} \equiv 1/\tilde{a}$, como la variable que rige el crossover.

Límite BCS, $\tilde{\eta} \rightarrow -\infty$, las partículas del gas (fermiones) interactúan muy débilmente formando pares de Cooper (BCS), de acuerdo a la descripción de la teoría BCS de superconductividad, en este caso el potencial químico debe tener como límite el valor de la energía de Fermi y el gap debe decaer exponencialmente.

Límite BEC, $\tilde{\eta} \rightarrow +\infty$, la interacción entre las partículas es capaz de formar moléculas diatómicas (estados ligados) con estados de espín opuesto y por lo tanto con espín entero (bosón). Si la temperatura es lo suficientemente baja entonces el gas en este régimen forma corresponde a un condensado de Bose-Einstein (BEC) molecular. En este caso es de esperar que las termodinámicas sean típicas de un gas de bosones, por ejemplo que el potencial químico sea negativo y la presión sea cero.

Ambos límites o regímenes se pueden alcanzar variando de manera continua la longitud de dispersión de las partículas del gas y a pesar que ambos límites tienen propiedades diferentes, la transición es suave y el comportamiento en $\tilde{\eta} = 0$ no indica ningún tipo de discontinuidad en

las variables del gas (potencial químico, energía, etc) aunque es un punto, conocido *unitariedad*, que ha generado mucho interés tanto en la parte experimental como teórica y en general se ha establecido en este punto las propiedades del gas son universales en el sentido de que son independientes de la interacción entre las partículas que componen al gas, más adelante se hace una breve discusión del régimen de unitariedad.

2.2. Termodinámica a temperatura cero ($T = 0$).

En el caso de temperatura cero, tal como lo hizo Leggett en su trabajo de 1980 [?], se obtiene haciendo: $\tanh(\beta E_{\mathbf{k}}/2) = 1$, en el par de ecuaciones (2.10). En este caso existen diferentes resultados analíticos a los cuales se puede llegar, estos resultados se pueden consultar en el texto de Pethick [Christopher Pethick, 2008]; en el artículo de Marini, et all [Marini et al., 1998] se hace un breve pero muy claro análisis de las ecuaciones (2.10) la cuales se pueden reducir a ciertas integrales y obtener resultados analíticos en los límites asintóticos: $\tilde{\eta} \rightarrow \mp\infty$; también se puede consultar [Ketterle and Zwierlein, 2008] donde se hace un análisis más extenso de los resultados analíticos en ambos extremos. A continuación se destacan algunas propiedades termodinámicas importantes en los límites de $\tilde{\eta} \rightarrow \mp\infty$:

Régimen BCS (gas fermionico), límite: $\tilde{\eta} \rightarrow -\infty$

En este caso el gap decae exponencialmente, comportamiento que es idéntico al de un estado superconductor de la teoría BCS; el potencial químico por otra parte es positivo y toma el valor de la energía de Fermi en el límite $\tilde{\eta} \rightarrow -\infty$; se puede verificar además que la presión corresponde tiende al valor $2\epsilon_F/5$ de la densidad del gas, ver figura 2.2 y que es el mismo de un gas de Fermi ideal.

$$\begin{aligned}\Delta &\approx \epsilon_F 8e^{-2} e^{-\pi/2k_F a}, \\ \mu &\approx \epsilon_F.\end{aligned}\tag{2.11}$$

Tanto el comportamiento del potencial químico como de la presión subrayan la propiedad fermiónica del gas y más aún corresponden al de un gas ideal de Fermi⁴ en el límite $\eta \rightarrow -1$. Hay otra propiedad relevante en este límite y consiste en que la expresión del gap Δ coincide con la energía de “enlace” de los estado de pares de Cooper lo cual es de esperar de acuerdo a la teoría BCS.

Régimen BEC (gas de bosones moleculares), límite: $\tilde{\eta} \rightarrow +1$

En este caso los resultados del gap y del potencial químico son los siguientes:

$$\begin{aligned}\Delta &\approx \epsilon_F \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{\frac{1}{\tilde{a}}}, \\ \mu_b &\approx -\frac{\hbar^2}{2m_r a^2} + \frac{4\pi\hbar^2}{2m_r} n_b 2a \approx -\frac{\hbar^2}{2m_r a^2},\end{aligned}\tag{2.12}$$

⁴Esto a pesar de que se trata de un gas con interacción, notar que el límite $\tilde{\eta} \rightarrow -\infty$ no necesariamente corresponde a interacción nula; sin embargo esto se puede entender por el hecho que el gap decae exponencialmente en este límite y tiende a cero.

Aquí la variable más “relevante” y que recalca la propiedad bosonica del gas es el potencial químico, μ_b , cuyo valor es negativo y su expresión asintótica se puede interpretar muy claramente: el primer término del potencial químico se puede identificar con la energía del estado ligado molecular⁵, $E_b = -\hbar^2/2m_r a^2$, mientras que el segundo término coincide con el resultado de Lee-Yang [Lee et al., 1957], a primer orden, del potencial químico de un gas de bosones interactuantes en la aproximación de campo medio⁶: $\mu \approx \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} n \left[1 + \frac{32}{3} \sqrt{\frac{a^3 N}{\pi V}} \right]$ (n_b es la densidad de bosones moleculares, $n_b = N/2$, si N es el número de fermiones en el gas). En este caso el gap crece sin cota y la presión tiende a cero como se espera en un gas ideal de Bose sin interacción, que se puede interpretar por el hecho que las “moléculas” bosonicas no interactúan. Por otra parte se puede verificar que la presión del gas tiende a cero, ver figura 2.2, tal como sucede en un gas de Bose ideal.

En general, la figura 2.1, muestran el comportamiento del gap y el potencial químico como función del inverso de la longitud de dispersión, y que se obtienen al resolver numéricamente el sistema de ecuaciones (2.10). En la ambas gráficas se muestra el valor aproximado de $\tilde{\eta}$ para el cual el potencial químico es cero ($\tilde{\mu} = 0$ para $\tilde{\eta} = 0,53$).

⁵De acuerdo a la teoría de dispersión en la aproximación de bajas energías y cuando la longitud de dispersión es muy grande ($a \gg 1$) se produce un estado ligado con energía: $E_b = -\hbar^2/2m_r a^2$, ver [Sakurai, 1994].

⁶Los bosones en el gas son moléculas formadas por dos fermiones y por lo tanto el potencial químico de los bosones es dos veces el potencial químico de los fermiones (mezcla balanceada): $\mu_{boson} = 2\mu_{fermion}$; además si los fermiones tiene igual masa m , entonces la masa reducida es $m_r = m/2$. En esta aproximación resulta que los bosones interactúan con una longitud de dispersión $2a$; un calculo más preciso al considerar la interacción entre pares de moléculas diatómicas resulta: $a_{molecules} \approx 0,6a$ [Petrov et al., 2004]

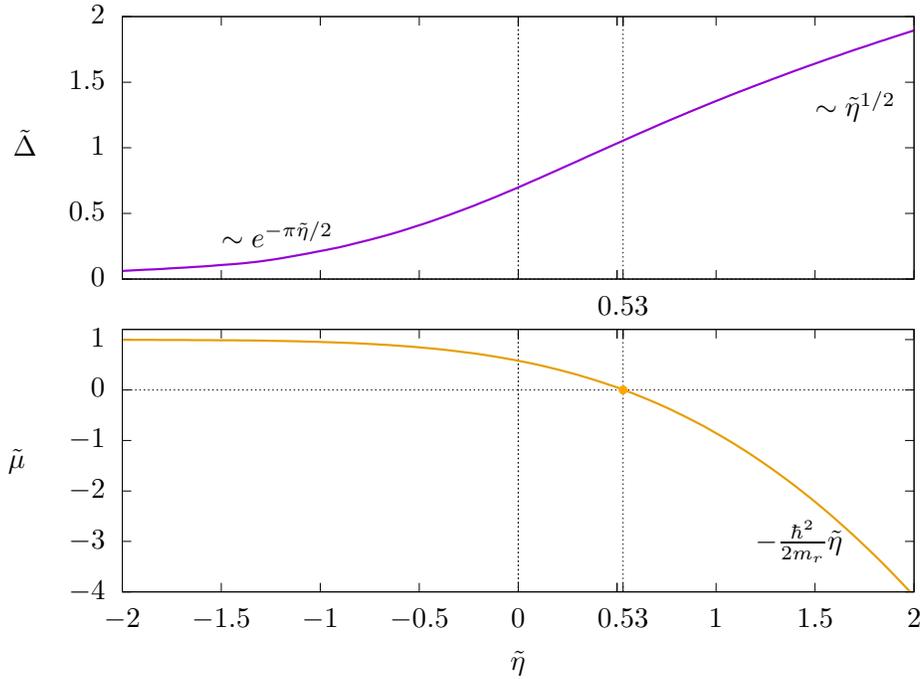


Figura 2.1: Variación del gap y potencial químico del gas como función del inverso de la longitud de dispersión $1/\tilde{a}$.

El gran potencial en el límite termodinámico y unidades de Fermi (incluyendo término de renormalización) se expresa de la siguiente manera:

$$\langle \tilde{\Omega} \rangle = \frac{3}{4} N \int_0^{\infty} \left[\left(x - \tilde{\mu} - \tilde{E}_x + \frac{\tilde{\Delta}^2}{2x} \right) \right] \sqrt{x} dx - \frac{3\pi}{8} N \tilde{\eta} \tilde{\Delta}^2. \quad (2.13)$$

En el caso de un gas de Fermi interactuante se satisface la siguiente relación termodinámica: $\langle \hat{\Omega} \rangle = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle - \mu \langle \hat{N} \rangle$, donde $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = E - \eta \mathcal{C}$ siendo E la energía interna del gas⁷. En el ensamble gran canónico, se obtiene la siguiente relación entre la presión y el gran potencial: $pV = -\langle \hat{\Omega} \rangle$, de manera que si se define el gran potencial por partícula: $\tilde{\omega} = \tilde{\Omega}/N$, entonces⁸: $\tilde{p}/3\pi^2 = -\tilde{\omega}$.

En la figura 2.2 se muestra el comportamiento general del gran potencial $\tilde{\omega}$, la presión $\tilde{p}/3\pi^2$, la energía por partícula $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle/N$ y el potencial químico $\tilde{\mu}$ del gas en función del inverso de la longitud de dispersión. Se pueden verificar los siguientes límites: la presión y la energía en el límite fermiónico ($\tilde{\eta} \rightarrow -\infty$) corresponden a la de un gas ideal de Fermi⁹: $\tilde{p}/3\pi^2 = 2/5 = 0.4$ y

⁷En la sección 6.1 se describe a detalle esta expresión del gran potencial.

⁸En unidades de Fermi el factor $3\pi^2$ corresponde a la densidad del gas: $k_F = 3\pi^2 N/V$

⁹En un gas ideal de Fermi a temperatura cero la energía y la presión están dadas por: $E = \frac{3}{5} N \epsilon_F$ y $p = \frac{2}{5} \frac{N}{V} \epsilon_F$, en el caso de un gas ideal de Bose la energía interna tiende a cero cuando se produce la condensación de Bose-Einstein.

$\tilde{E}/N = 3/5 = 0.6$; mientras que en el límite bosónico ($\tilde{\eta} \rightarrow +\infty$) la presión tiende a cero lo cual es de esperar en un gas de Bose, en el caso de la energía por partícula se nota que tiene como límite la energía del estado ligado: $\tilde{E}/N = -\hbar^2/2m_r a^2 = -\tilde{\eta}^{-2}$.

A partir de estos resultados, desde el punto de vista de la termodinámica del gas de Fermi, se verifican ambos regímenes: gas de Fermi cuando la longitud de dispersión es negativa y gas de Bose cuando la longitud de dispersión es positiva; además, ambos regímenes se obtienen al variar de manera continua la longitud de dispersión. Estas propiedades termodinámicas son una evidencia macroscópica del comportamiento del gas de Fermi con interacción; sin embargo, también es posible hacer un análisis “microscópico” del gas de Fermi a través de las funciones de onda del sistema como se describe en la sección 2.4. En la siguiente sección se describe el comportamiento de la *variable de contacto*, que se puede entender como la variable conjugada del inverso de la longitud de dispersión y que ha llamado la atención por su carácter que se supone universal [Braaten, 2012].

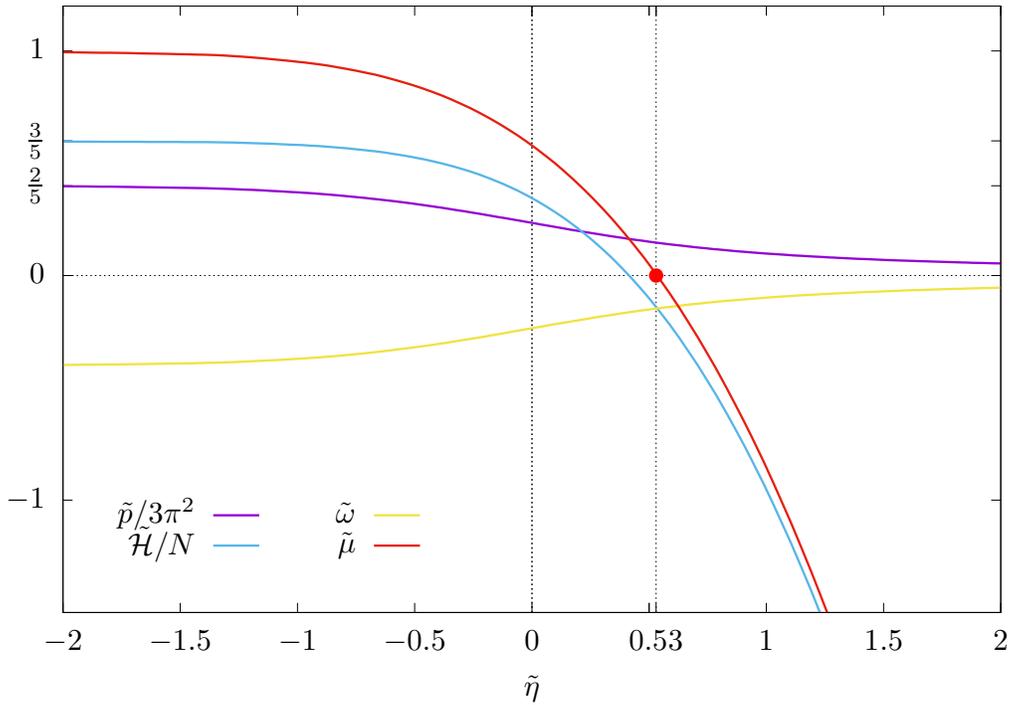


Figura 2.2: Comportamiento de la presión \tilde{p} , energía interna \tilde{E} , gran potencial $\tilde{\Omega}$, como función del inverso de la longitud de dispersión $1/\tilde{a}$.

2.3. Variable de contacto.

Otra de las propiedades del crossover que ha atraído la atención se refiere a la *variable de contacto*. Esta variable, desde un punto de vista termodinámico, surge por el hecho de que la longitud de dispersión $1/a = \eta$ puede variar de manera continua y por lo tanto es posible definir su variable conjugada [Romero-Rochín, 2011], siendo el contacto C la variable conjugada a la longitud de dispersión. En 2008 Shina Tan publicó tres artículos donde introduce la variable de contacto [Tan, 2008a, Tan, 2008b, Tan, 2008c] en relación al comportamiento del número de ocupación $n_{\mathbf{k}}$ de las partículas en un gas de Fermi con partículas que interactúan en la aproximación de potencial de contacto; de acuerdo al trabajo de S. tan, la variable de contacto C se puede expresar, en el límite cuando \mathbf{k} es muy grande, de la siguiente manera: $C \equiv \lim_{k \rightarrow \infty} k^4 n_{\mathbf{k}}$. S. Tan muestra algunas propiedades relevantes de la variable de contacto, por ejemplo su relación con las correlaciones en la densidad del gas, pero de manera importante para este trabajo, la variable de contacto satisface la siguiente expresión conocida como *relación adiabática*:

$$C = -\frac{4\pi m}{\hbar^2 V} \left[\frac{\partial E}{\partial (1/a)} \right]_{S,V,N}. \quad (2.14)$$

Donde $E = E(S, V, N, 1/a)$ es la energía interna del gas de Fermi, que tiene una dependencia con el inverso de la longitud de dispersión, $1/k_F a$. La relación adiabática es consistente con la propiedad termodinámica, en el gas de Fermi, de que el inverso de la longitud de dispersión pueda variar continuamente y en el capítulo 6 se discute a detalle esta propiedad lo cual permite calcular la variable de contacto para un potencial de interacción finito. Trabajos posteriores a los de S. Tan han derivado ciertas relaciones de la variable de contacto que suponen tienen carácter universal, ver [Braaten, 2012], lo cual ha dado importancia al análisis de esta variable.

La expresión de la variable de contacto en el modelo de potencial de contacto se puede obtener empleando la expresión del gran potencial, ecuación (2.13). Para ello primero hay que aclarar la equivalencia entre las siguientes derivadas: $\partial E / \partial (1/a) = \partial \Omega / \partial (1/a)$, donde Ω es el gran potencial por lo que en unidades de Fermi la relación adiabática de S. Tan (2.14) se expresa como¹⁰:

$$\tilde{C} = -\frac{2}{3\pi N} \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \tilde{\eta}}, \quad (2.15)$$

de la ecuación expresión del gran potencia en el modelo de un potencial de contacto, ecuación (2.13), se obtienen las siguientes expresiones:

$$-\frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \tilde{\eta}} = \frac{3\pi}{8} N \tilde{\Delta}^2, \quad \Rightarrow \quad \tilde{C} = \frac{\tilde{\Delta}^2}{4}. \quad (2.16)$$

manera, en el modelo del crossover empleando un potencial de contacto la variable de contacto es proporcional al cuadrado del gap. Existen además ciertas aproximaciones del contacto en los

¹⁰Notar que las dimensiones de la variable de contacto de acuerdo a la definición de S. Tan son: $[C] = L^{-4}$

extremos BCS y gas de Bose que se pueden obtener a partir de las expresiones de la energía para un gas de Fermi o de Bose débilmente interactuante, estas comparaciones se pueden consultar en la siguiente referencia: [Randeria et al., 2012a].

Para fines de comparación con los resultados del presente trabajo, expuestos en el capítulo 6 para el cálculo de la variable de contacto empleando un potencial de interacción finito, denotaremos a la derivada del gran potencial (o la energía) como: $\tilde{\mathcal{C}} \equiv \partial\tilde{\Omega}/\partial\tilde{\eta}$, que excepto factores constantes (ver ecuación (2.16)) corresponde a la variable de contacto definida por S. Tan. En la figura 2.3 se muestra el comportamiento de la variable de contacto $\tilde{\mathcal{C}}$ a partir del modelo del potencial de contacto, ecuación (2.16).

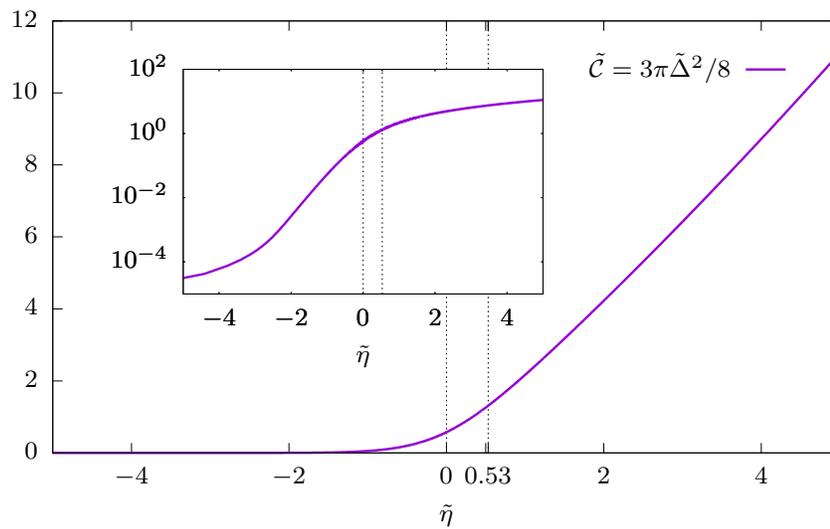


Figura 2.3: Comportamiento de la variable de contacto $\tilde{\mathcal{C}}$, ecuación (2.16); en el recuadro se muestra la misma variable de contacto pero en escala logarítmica.

2.4. Funciones de pares.

De acuerdo a la teoría BCS en un sistema de fermiones, en dos estados de espín opuestos, con interacción el estado más estable es aquel en el que las partículas forman pares (*pares de Cooper*) entre dos partículas con estados de espín opuesto. Tal como se describe en el trabajo Cooper de 1956 [Cooper, 1956] los pares de fermiones (pares de Cooper) corresponde a estados ligados pero con dos características muy importantes: su energía de enlace decae exponencialmente con la interacción (atractiva V_0) entre partículas: $E_p \sim e^{-1/V_0}$ y su función de onda decae algebraicamente: $\psi_p \sim 1/r$, siendo r la coordenada radial. Esta última propiedad es relevante ya que entonces el tamaño de los pares suele ser mucho mayor al espacio entre partículas del

gas lo cual difiere totalmente a un “típico” estado ligado tal como una molécula diatómica que se puede localizar en el espacio. Ambas propiedades en los pares de Cooper se satisface cuando la interacción entre partículas es atractiva y tan débil como sea o la longitud de dispersión sea negativa. Sin embargo, tal como se ha mencionado, el crossover se puede entender como una extensión de la teoría BCS para un gas de Fermi con interacción donde la longitud de dispersión puede tomar valores negativos y positivos. Lo que se puede demostrar es que para valores positivos de la longitud de dispersión, justo cuando la longitud de dispersión diverge y cambia de signo, la energía del estado ligado es proporcional al inverso del cuadrado de la longitud de dispersión: $E_p = -\hbar^2/2m_r a^2$ (ver expresión del potencial químico, ecuación 2.12) y más importante para los propósitos del presente trabajo se puede demostrar que su función de onda decae exponencialmente: $\psi_p \sim e^{-r/a}$, [Petrov et al., 2004] lo cual indica un estado ligado diatómico.

Desde un punto de vista microscópico la imagen que se tiene del gas de Fermi al modificar la longitud de dispersión es que en el gas las partículas (fermiones) son “capaces” de formar pares de Cooper cuando la interacción es débilmente atractiva, lo cual se satisface cuando la longitud de dispersión es negativa ($\eta < 0$) o formar dímeros o partículas diatómicas cuando la interacción se incrementa de tal manera que la longitud de dispersión cambia de signo¹¹ ($\eta > 0$). La diferencia entre ambos regímenes en el gas se puede establecer a través sus propiedades termodinámicas, como se ha expuesto antes, o a través de las propiedades de las funciones de onda de pares de partículas: en el límite de longitud de dispersión negativa las funciones de pares decaen algebraicamente y por otra parte en el límite de longitud de dispersión positivo las funciones de pares decae exponencialmente.

La función de onda de los estados de pares de partículas en estados de espín opuesto en un gas de Fermi se pueden obtener a partir de los parámetros variacionales $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$, ecuación (2.3), y en el capítulo 7 se discute más a detalle. La función de pares tiene la siguiente expresión [Leggett, 2006], [Ketterle and Zwierlein, 2008]:

$$\psi_p(r) = \frac{1}{V} \sum F_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{r}}, \quad (2.17)$$

donde: $F_{\mathbf{k}} \equiv u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}$, se puede demostrar que el término de interacción en el Hamiltoniano está dado por: $\hat{\mathcal{H}}_p = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}} F_{\mathbf{k}'}$, a partir de esta expresión se puede interpretar los factores $F_{\mathbf{k}}$ como las funciones de pares en el espacio de momento, es decir $F_{\mathbf{k}}$ corresponde a la transformada de Fourier de la función ψ_p . Empleando las expresiones para $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ de la ecuación (2.3) y reemplazando la suma por una integral (considerando el límite termodinámico cuando hay un continuo de estados) se obtiene la siguiente expresión:

$$\psi_p(r) = \frac{C}{(2\pi)^3} \int \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{r}} d^3k, \quad (2.18)$$

¹¹En el capítulo 4 se muestra como la interacción entre un sistema de dos cuerpos permite el cambio de signo de la longitud de dispersión y precisamente justo cuando ocurre este cambio se produce un estado ligado en el sistema de dos partículas.

donde C es una constante de normalización. En la aproximación del gap constante y simplificando la integral se puede llegar al siguiente resultado de las funciones de pares:

$$\psi_p = \frac{C}{(2\pi)^2} \frac{\Delta}{r} \int_0^\infty \frac{\text{sen}(kr) k dk}{E_k} \quad (2.19)$$

La función de pares depende implícitamente con el inverso de la longitud $\tilde{\eta}$ a través del gap Δ y del potencial químico μ , ver figura 2.1. En la figura 2.4 se presentan la función de pares para diferentes valores de $\tilde{\eta}$, tanto valores negativos como positivos. Para apreciar de mejor manera el comportamiento de las funciones de onda, lo que se muestra en la figura es: $r \psi_p / \psi_{max}$, donde ψ_{max} es el valor máximo de la función de pares; además, la coordenada radial tiene unidades de Fermi, $\tilde{r} = r k_F$. El comportamiento de la función de pares es muy claro, en el límite BCS ($\eta < 0$) la función de pares tiene oscilaciones muy marcadas con una envolvente que decae algebraicamente, mientras que en el límite BEC ($\tilde{\eta} > 0$) la función de pares las oscilaciones desaparecen y esta localizada. Este comportamiento de la función de pares esta de acuerdo al hecho que en el régimen BCS el estado del gas es de pares de Cooper y en el límite BEC las partículas forman dímeros.

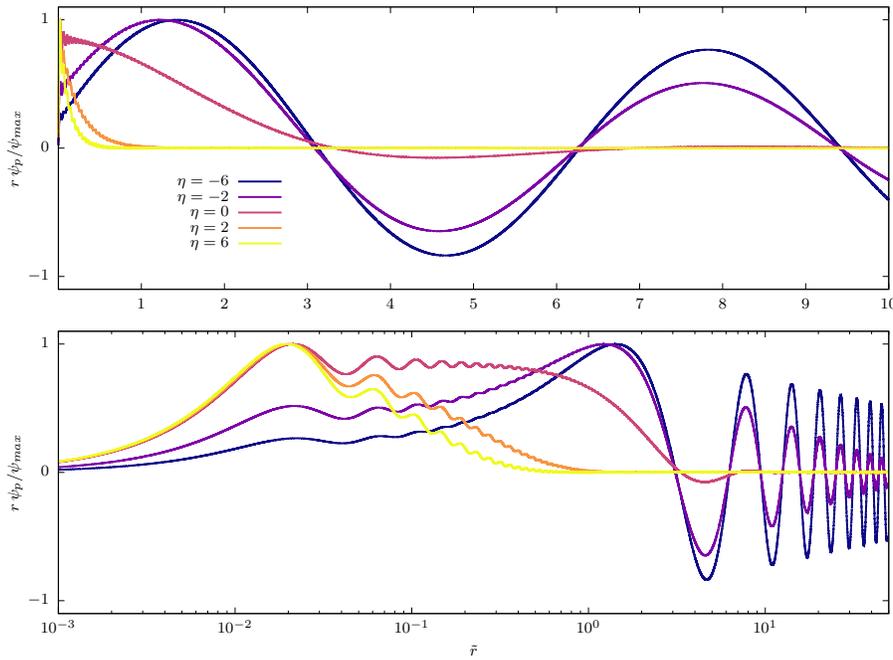


Figura 2.4: Comportamiento de la función de pares ψ_p en el crossover (diferentes valores del inverso de la longitud de dispersión $\tilde{\eta}$), en el panel superior se presentan en escala lineal de \tilde{r} y en el panel inferior en escala logarítmica.

CAPÍTULO 3

Resultados y técnicas experimentales en gases atómicos.

EL interés por los fenómenos de bajas temperaturas en la física tiene larga historia y se remonta a los trabajos de Joule y Kelvin cuando notaron el enfriamiento del aire y otros gases como el oxígeno y el nitrógeno al hacerlos pasar a través de un medio poroso cuando investigaban la expansión de diferentes gases; actualmente este proceso se le conoce como efecto Joule-Kelvin. Posteriormente, con un interés por lograr licuar diferentes gases, se logró la licuefacción del oxígeno, nitrógeno e hidrógeno empleando la misma técnica de Joule-Kelvin así como el uso de nuevas técnicas de enfriamiento. Aquí es importante reconocer el trabajo de diferentes físicos que trabajaron esta área, entre ellos: Andrews, Cailletet, Pictet, Olszewski, Wroblewski y Dewar, que en el periodo comprendido entre 1860-1900, contribuyeron al enfriamiento y licuefacción de estos gases para lo cual fue necesario obtener temperaturas alrededor de 240 K para la licuefacción del aire (Cailletet, Pictet) hasta los 20 K para la licuefacción del hidrógeno (Dewar, Olszewski). Cabe destacar el hecho notable que fue la licuefacción del helio por parte de Kamerlingh Onnes a la temperatura de 4.2 K [[Mendelssohn, 1965](#)]. Con la licuefacción del helio se motivaron diferentes investigaciones y producto de ellas se descubrieron dos de los más importantes fenómenos del siglo pasado en la física: la superconductividad (1911 Kamerlingh Onnes) y la superfluidéz (1938 Piotr Kapitza), ambos fenómenos a una temperatura cercana de 4 K, en el año 1913 Onnes recibió el premio Nobel de física por sus investigaciones. Posterior a la muerte de Kamerlingh Onnes, Giauque y Debye idearon la técnica de enfriamiento magnético mediante la cual lograron temperaturas inferiores a 0.01 K en sales paramagnéticas [ibíd].

Durante la última década del siglo pasado (1990) inicio un nuevo paradigma para alcanzar temperaturas del orden de micro y nano Kelvin en gases atómicos basado en el enfriamiento láser desarrollado por Steven Chu, Cohen-Tonnoudji y William Phillips; desde entonces ha surgido un auge en los sistemas de bajas temperaturas tanto experimental como teórica. La posibilidad de llegar a estas bajas temperaturas ha permitido corroborar experimentalmente la condensación de Bose-Einstein y el gas degenerado de Fermi que hasta entonces solo eran conceptos teóricos de la física. Aquí es importante decir que tanto el Condensado de Bose-Einstein como el gas

degenerado de Fermi son fenómenos que se presentan en gases cuánticos sin interacción (ideales) mientras que en los experimentos es inevitable eludir las interacciones entre átomos, de manera que la condensación de Bose-Einstein así como el gas degenerado de Fermi en un experimento se entienden como estados donde la gran parte de los átomos del gas se encuentran en el estado base tal como se evidencia.

La posibilidad de alcanzar temperaturas entre 10^{-6} y 10^{-9} K ha sido de gran relevancia en la física ya que ha permitido investigar los sistemas cuánticos de muchas partículas. En el año de 1995 se obtuvo por primera vez el condensado de Bose-Einstein (BEC) por diferentes grupos de varias universidades utilizando gases alcalinos: con ^{87}Rb por Eric Cornell y Carl Wieman en la universidad de Colorado [Anderson et al., 1995]; con ^{23}Na por Wolfgang Ketterle en el MIT [Davis et al., 1995b] y con ^7Li por Randall Hulet en la universidad de Rice [Bradley et al., 1995]. Por otra parte, el gas degenerado de Fermi se logró obtener en el año 1999 con un gas de ^{40}K por el grupo de Deborah Jin en la Universidad de Colorado [DeMarco and Jin, 1999]. Cabe mencionar que en 2001 W. Ketterle, E. Cornell y C. Wieman recibieron el premio noble de física por obtener el BEC. Estos logros experimentales fueron la punta de lanza para la investigación de sistemas cuánticos como las redes ópticas, turbulencia (cuántica) en BEC, sistemas de baja dimensionalidad, gases interactuantes, entre otros. De manera importante para este trabajo los gases de Fermi interactuantes fueron posibles obtenerlos mediante la manipulación de la interacción entre átomos utilizando el concepto de resonancia de Feshbach. En 1998 W. Ketterle logró producir estados moleculares de pares de fermiones empleando una resonancia de Feshbach [Inouye et al., 1998] y en 2004 los grupos de W. Ketterle en el MIT y de D. Jin en la universidad de Colorado consiguieron producir la fase condensada de Bose-Einstein a partir de un gas de fermiones en dos estados de espín diferentes [C. A. Reagal and Jin, 2004], [Zwierlein et al., 2004] respectivamente. A continuación se presenta una breve descripción de las técnicas experimentales que han permitido obtener temperaturas de micro y nano Kelvin.

3.1. Confinamiento magnético.

Para lograr llevar a los gases atómicos a temperaturas inferiores de microkelvin es necesario confinarlos de tal manera que se mantengan aislados, para ello se emplean trampas magnéticas que permiten obtener densidades del orden de entre 10^{12} y 10^{14} partículas por cm^3 . El confinamiento de los gases se hace en cámaras de ultravacío con presiones del orden de 10^{-11} Torr [Anderson et al., 1995]. Estas trampas consisten en arreglos de bobinas que producen campos magnéticos que interactúan con el momento magnético de los átomos de tal manera que los átomos son confinados por potenciales que dependen de la posición $U(\vec{r})$. La energía de interacción entre un átomo con momento angular μ_B (magnetón de Bohr) y un campo magnético externo $\vec{B}(\vec{r})$ está dada por [Foot, 2005]:

$$U(\mathbf{r}) = g_F \mu_B M_F |\vec{B}(\vec{r})|, \quad (3.1)$$

donde g_F es el factor de Landé para el acoplamiento I-J y M_F es la proyección del momento magnético total del átomo, se puede verificar que en general: $g_F \mu_B > 0$. Si el campo magnético $\vec{B}(\vec{r})$ depende de la posición \vec{r} entonces el potencial de confinamiento $U(\vec{r})$ ejerce sobre los

átomos una fuerza que depende de la posición: $\vec{F}(\vec{r}) = -\nabla U = -g_F \mu_B M_F \nabla |\vec{B}(\vec{r})|$. En la práctica se busca un campo magnético $\vec{B}(\vec{r})$ que contenga un mínimo capaz de confinar los átomos en una región acotada del espacio. Para lograr esto lo común es usar dos arreglos de bobinas: uno para el confinamiento radial y otro para el confinamiento axial, este tipo de arreglo de bobinas se le conoce como *trampas Ioffe-Pritchard* y a continuación se hace una breve descripción.

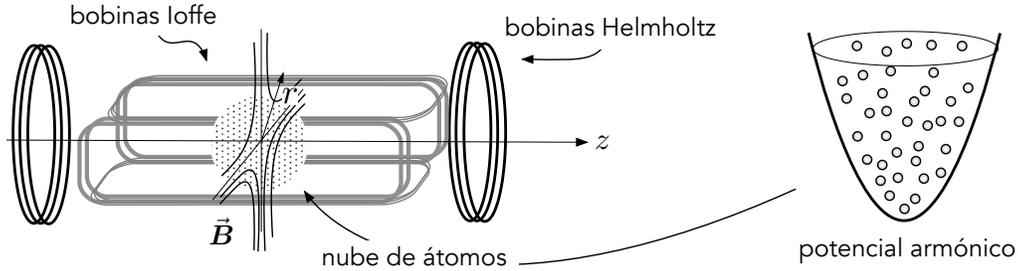


Figura 3.1: Esquema de una trampa magneto-óptica tipo Ioffe-Pritchard para confinar los gases atómicos. Las bobinas Ioffe producen un potencial cuadrupolar que en conjuntos con las bobinas Helmholtz generan un potencial armónico en el centro de la trampa.

El confinamiento radial se consigue mediante un cuadrupolo magnético que consisten en dos pares de bobinas colocadas paralelamente (*bobinas Ioffe*), se puede demostrar que en este caso el campo magnético tiene simetría cilíndrica o axial donde la componente z es nula y hay una dependencia radial en la dirección angular ϕ : $\vec{B}(r, \phi, z) = -Br\hat{\phi}$, donde B es una constante, esta forma del campo magnético produce un potencial de confinamiento lineal:

$$U(r) = (g_F \mu_B M_F B) r. \quad (3.2)$$

que se le conoce como *potencial cuadrupolar*. Si un átomo se encuentra en un estado con $M_F > 0$, la fuerza es de atracción hacia el eje z donde al mínimo del potencial de esta forma los átomos pueden ser confinados sobre del eje z (los átomos con estado $M_F < 0$ escapan del confinamiento). Existe una desventaja con esta configuración del campo magnético, ya que en el eje z donde se confinan los átomos el campo es nulo lo que provoca que la separación energética, debida al efecto Zeeman, entre estados con distinto número cuántico M_F sea pequeña o nula. Si los átomos cambian fácilmente de un estado con $M_F > 0$ a estados con $M_F < 0$, debido a la pequeña brecha energética, entonces escapan del confinamiento radial. Para eliminar este defecto se aplica un campo magnético adicional, $\mathbf{B}'(z)$, generado por un arreglo de bobinas Helmholtz en la dirección axial; el campo producido por estas bobinas tiene componente axial y es de manera aproximada uniforme en el origen: $\mathbf{B}'(0) = B_0 \hat{z}$, donde B_0 es constante. De esta manera el campo magnético total en la región cercana al origen está dado por: $\mathbf{B}(r, \phi, z) = -Br\hat{\phi} + B_0 \hat{z}$, con lo cual: $B(r) = [B_0^2 + B^2 r^2]^{1/2} \simeq B_0 + \frac{B^2 r^2}{2B_0}$; y por lo tanto el potencial de confinamiento está dado por [Foot, 2005]:

$$U(r) = g_F \mu_B M_F \left(B_0 + \frac{B^2 r^2}{2B_0} \right) = U_0 + \frac{1}{2} m \omega_r^2 r^2, \quad (3.3)$$

donde m es la masa de los átomos y $\omega_r = \sqrt{\frac{g_F \mu_B M_F}{m B_0}} B$ corresponde a la frecuencia de oscilación del confinamiento radial, el valor mínimo del potencial está dado por: $U_0 = g_F \mu_B M_F B_0$. El mismo arreglo de bobinas Helmholtz se utiliza para el confinamiento axial que como se ha descrito tiene componente en la dirección z y se puede demostrar que la intensidad varía cuadráticamente: $|\mathbf{B}'(z)| \simeq B_0 + B'z^2$. Donde B' es constante. Así el potencial de confinamiento es armónico (cuadrático) en la dirección axial y radial con frecuencias: $\omega_z = \sqrt{2B'/m}$ y ω_r respectivamente; con esto es posible confinar los átomos en una nube de tipo cilíndrica ($\omega_z < \omega_r$) o esférica ($\omega_z = \omega_r$).

3.2. Enfriamiento láser y evaporativo

La idea del enfriamiento láser consiste en frenar o disminuir la velocidad de los átomos en un gas mediante la luz (radiación electromagnética) producida por un láser. Como es sabido la temperatura de un gas está relacionada con la energía cinética media de las partículas de un gas: $\langle E_k \rangle \propto k_B T$, de tal manera que al reducir la energía cinética de las partículas entonces la temperatura del gas disminuye. La técnica de *enfriamiento láser* consiste en frenar los átomos de un gas mediante la absorción y emisión de fotones producidos por un láser. Esta técnica revolucionaria en la física atómica fue desarrollada por Steven Chu, Cohen-Tannoudji y William Phillips y por la cual merecieron el premio Nobel de física en 1997.

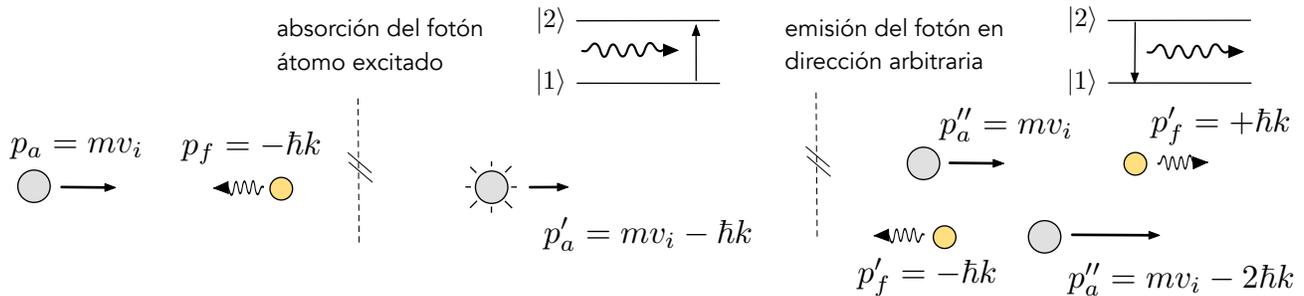


Figura 3.2: Proceso del enfriamiento láser: un átomo que se mueve con momento p_a absorbe un fotón que se propaga en dirección contraria con momento $-\hbar k$; después de un intervalo de tiempo el átomo emite un fotón con la misma energía en dirección arbitraria por lo que en promedio el átomo disminuye su velocidad en la cantidad $-\hbar k$.

Para entender de manera sencilla el frenamiento de los átomos consideremos el movimiento de un átomo y un fotón en una dimensión, supongamos que el átomo inicialmente está en su estado base $|1\rangle$ y se desplaza con momento inicial: $p_a = mv_i$, mientras que el fotón que se propaga en dirección contraria al átomo con momento inicial: $p_f = -\hbar k$. Supongamos que el

fotón es absorbido por el átomo y pasa a un estado excitado $|2\rangle$, por conservación de momento: $p'_a = mv_i - \hbar k$. Después de cierto tiempo el átomo decae a su estado base emitiendo un fotón con la misma energía que el absorbido pero emitido en las dos direcciones posibles: $p'_f = \pm \hbar k$, de manera que el momento final del átomo puede tener dos valores: $p''_a = mv_i$ o $p''_a = mv_i - 2\hbar k$, como la dirección de emisión del fotón es arbitraria (emisión espontánea), en promedio el momento final del átomo es: $\langle p''_a \rangle = [(mv_i) + (mv_i - 2\hbar k)]/2 = mv_i - \hbar k$. La velocidad del átomo se reduce un valor: $v_{fre} = -\hbar k/m$, por cada proceso de absorción-emisión de un fotón, después de varios de estos procesos el átomo puede reducir su velocidad hasta valores del orden de 30 m/s. Para un gas cuyas partículas tienen en promedio esta velocidad corresponde una temperatura del orden de microkelvin.

Frenamiento por radiación láser.

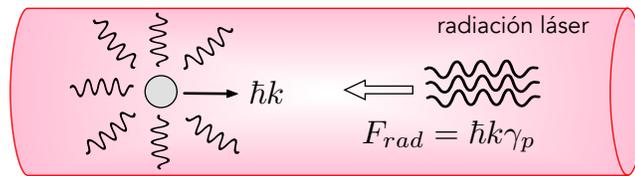


Figura 3.3: Frenamiento de un átomo por radiación de un láser en una dirección.

Un análisis semiclásico suponiendo al átomo como un sistema cuántico de dos niveles interactuando con un campo de radiación (láser) permite obtener una expresión de la fuerza que se ejerce sobre un átomo debida al campo de radiación [Metcalf and van der Straten, 1999]: $F_{rad} = \hbar k \gamma_p$, donde $\gamma_p = 1/2\tau$ siendo τ la vida media del estado excitado del átomo y k su momento. Esta fuerza se presenta cuando la frecuencia del láser ω_ℓ y la de resonancia del átomo ω_0 tienen de manera aproximada el mismo valor: $\omega_\ell \approx \omega_0$ [ibíd]. Es interesante mencionar que la máxima desaceleración a_{rad} posible para un átomo puede llegar a valores de 10^5 veces la aceleración de la gravedad [Foot, 2005]. Debido a que el átomo está en movimiento respecto del sistema del láser hay un corrimiento en la frecuencia del láser por efecto Doppler: $\omega'_\ell = \omega_\ell + kv$, por lo que para compensarlo se aplica un gradiente de campo magnético de tal manera que la frecuencia de resonancia del átomo cambie por efecto Zeeman, es por ello que esta técnica se le conoce como *frenamiento Zeeman*. Suponiendo que la fuerza de radiación es constante y el átomo se desplaza solo en una dirección es posible determinar la distancia L_0 para que el átomo se frene hasta llegar a una velocidad final v_0 : $L_0 = v_0^2/a_{rad}$, en la práctica esta longitud puede variar entre algunos centímetros hasta metros, dependiendo de la temperatura inicial del gas, del elemento, entre otros parámetros, en el cuadro 3.1 se dan algunos valores.

Para frenar los átomos de un gas que se desplazan en cualquier dirección se emplean tres pares de láseres ortogonales que se propagan en direcciones, en este caso se puede demostrar que la fuerza es proporcional a la rapidez de los átomos [Foot, 2005]:

$$\vec{F}_{mel} = -\alpha \vec{v}, \quad (3.4)$$

donde el coeficiente α es positivo y está relacionado con el factor γ_p visto anteriormente. Esta fuerza es similar a la que se presenta en objetos que se desplazan en un medio viscoso por lo que a esta técnica de enfriamiento de un gas se le conoce como *melazas ópticas*.

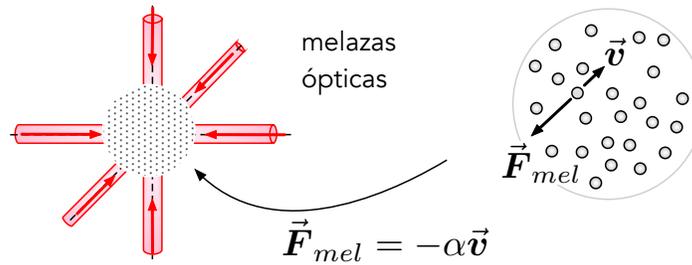


Figura 3.4: Disposición de un conjunto de láseres, *melazas ópticas*, para frenar los átomos de un gas que se mueven libremente en cualquier dirección.

La técnica de enfriamiento láser tiene una temperatura mínima T_{min} por debajo de la cual no es posible seguir enfriando al gas, que en gases atómicos alcalinos suele ser del orden de microkelvin, esto se debe a que en el enfriamiento láser la continua emisión y absorción de fotones provoca que el átomo se mueva en dirección aleatoria, lo que provoca que el átomo tenga un movimiento similar al browniano y como consecuencia no se frene por completo ($v \neq 0$). Un análisis del movimiento aleatorio del átomo en el espacio de momentos, con pasos $\hbar k/m$ en cada emisión de un fotón, determina la temperatura mínima [Foot, 2005]: $T_{min} = \hbar\Gamma/2k_B$, donde $\Gamma = 1/\tau$ es el inverso de la vida media del estado excitado del átomo. En el cuadro 3.1 se dan algunos valores τ y T_{min} [Metcalf and van der Straten, 1999] para algunos gases alcalinos empleados comúnmente en los experimentos. Sin embargo, para lograr el condensado de Bose-Einstein o el gas degenerado de Fermi es necesario obtener temperaturas del orden de nanokelvin que corresponde a la temperatura crítica del condensado de Bose-Einstein y del gas degenerado de Fermi en gases atómicos cuyas densidades son del orden de $10^5 - 10^{10}$ las cuales son típicas en los experimentos.

Enfriamiento evaporativo.

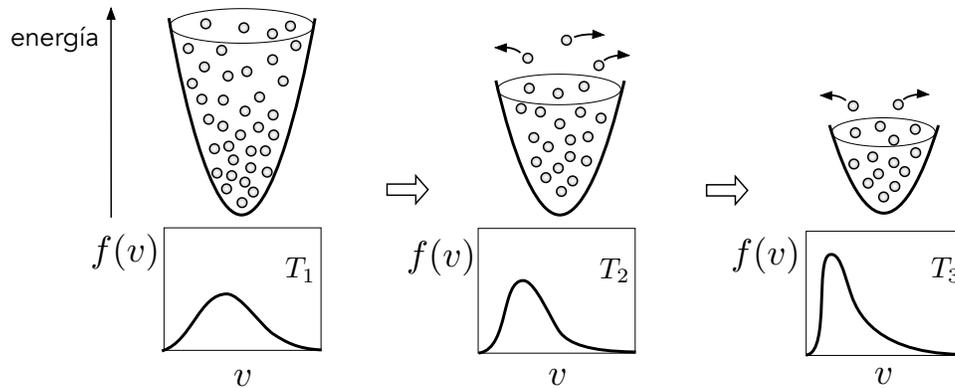


Figura 3.5: En el enfriamiento evaporativo se disminuye la intensidad del potencial de confinamiento dejando que los átomos más energéticos escapen, el gas termaliza a una nueva distribución de velocidades $f(v)$ cuya velocidad promedio es menor que corresponde a una temperatura menor en el gas ($T_3 < T_2 < T_1$).

Para enfriar los gases atómicos por abajo del límite del enfriamiento láser se emplea la técnica de enfriamiento evaporativo cuya idea es muy simple y consiste en dejar escapar las partículas

más energéticas (rápidas) de gas disminuyendo la intensidad del potencial de confinamiento, así las partículas que quedan tienen menor energía y por lo tanto se obtiene una temperatura menor en el gas, en la práctica este proceso se suele hacer gradualmente: se disminuye la intensidad del potencial permitiendo que los átomos con mayor velocidad escapen y se deja que el gas termalice llegando a una nueva distribución de velocidades de equilibrio $f(v)$, donde la velocidad promedio disminuye y que corresponde a una temperatura menor; este proceso se suele repetir varias veces a fin de llegar a temperaturas del orden de nanokelvin. En el enfriamiento evaporativo se reduce tanto el número de partículas así como el espacio de confinamiento del gas y es por esto que los gases ultrafríos producidos en los laboratorios son de escalas milimétricas y de baja densidad.

Elemento	T_i (fuente de átomos) (K)	$\langle v_0 \rangle$ (m/s)	L_0 (m)	τ (ns)	T_{min} (μ K)
^1H	1000	5000	0.012	1.60	2389.
^4He	650	2013	4.4	106.83	35.75
^7Li	1017	2051	1.5	26.87	142.11
^{23}Na	712	876	0.42	15.90	240.18
^{39}K	617	626	0.77	26.13	146.16
^{85}Rb	568	402	0.75	26.63	143.41
^{133}Cs	544	319	0.93	30.70	124.39

Cuadro 3.1: Tabla hecha con información de [Metcalf and van der Straten, 1999]

3.3. Resonancias de Feshbach

La resonancia de Feshbach en la dispersión de un par de partículas es el mecanismo mediante el cual ha sido posible manipular la interacción entre las partículas en un gas. La resonancia de Feshbach ocurre cuando hay un “acoplamiento” entre los estados dispersados del continuo de un par de partículas y el estado ligado del mismo par. El acoplamiento entre ambos estados es posible por dos factores: por una parte al hecho que los átomos tienen momento angular y el potencial de interacción efectivo entre átomos depende del acoplamiento del momento angular total, si consideramos un par de átomos en dos estados de espín (\uparrow, \downarrow) el potencial efectivo de interacción puede corresponder al estado triplete (V_T) o al estado singlete (V_s) como se muestra en la figura 3.6. El otro factor que hace posible la resonancia de Feshbach consiste en que al aplicar un campo magnético externo B entonces el potencial singlete V_s puede variar su energía por efecto Zeeman una cantidad: $\Delta\mu B$, donde $\Delta\mu$ es la diferencia del momento magnético del átomo, tal como se muestra en la figura 3.6.

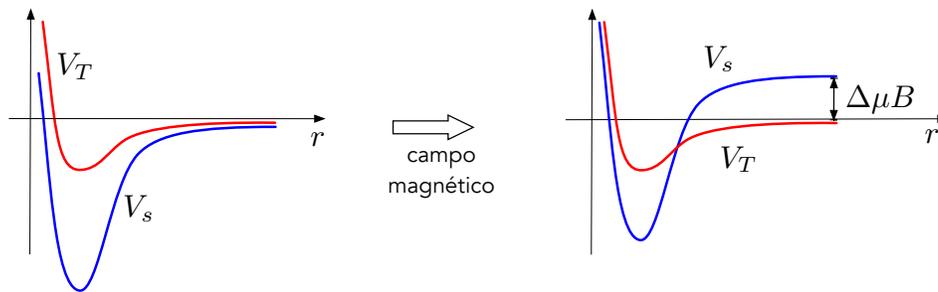


Figura 3.6: Potencial de interacción de un par de partículas en dos estados de espín (\uparrow, \downarrow). El potencial de interacción depende del estado de momento angular total: triplete (V_T) o singlete (V_s). Aplicando un potencial magnético externo el potencial V_s varía su energía por un valor $\Delta\mu B$, donde $\Delta\mu$ es la diferencia del momento magnético de los átomos.

Un par de átomos que interactúan con energía E en el estado dispersado o *canal abierto* como se le suele llamar se acopla con el estado ligado del potencial singlete o *canal cerrado* de energía E_b , dicho acoplamiento depende de la separación: $\Delta\mu B$ entre ambos potenciales o canales. La resonancia de Feshbach se produce cuando la energía del canal abierto E se aproxima a la energía del estado ligado E_b del canal cerrado, en este caso el par de átomos forman un estado ligado molecular.

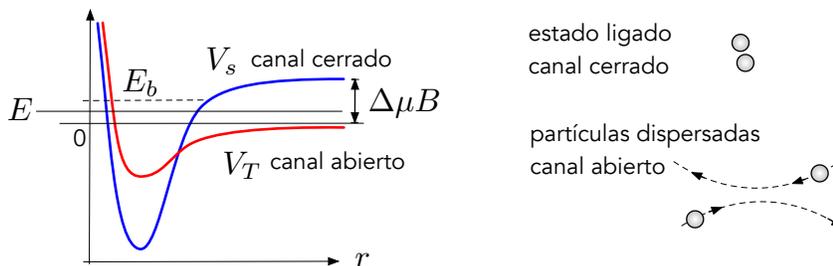


Figura 3.7: Resonancia de Feshbach de un sistema de dos partículas, el canal abierto corresponde al potencial donde las partículas son dispersadas y el canal cerrado (V_s) al potencial donde las dos partículas forman un estado ligado de energía E_b , la separación entre ambos potenciales $\Delta\mu B$ se puede modular mediante un campo magnético externo B .

La teoría de la resonancia de Feshbach se puede abordar desde diferentes formalismos, por ejemplo en [Moerdijk et al., 1995] se resuelve empleando funciones de Green y se aplica para los gases atómicos: ^6Li (fermión), ^7Li (bosón) y ^{26}Na (fermión), en [Duine and Stoof, 2004] usa como modelo para los potenciales triplete y singlete un pozo esférico, una extensa revisión de la resonancia de Feshbach se puede consultar en [Chin et al., 2010]. La idea de la resonancia de Feshbach consiste en resolver el problema de dos partículas incluyendo las soluciones de los estados dispersados y del estado ligado para los potenciales del canal abierto y cerrado,

respectivamente. Consideremos los eigenestados de partícula libre¹: $H_0 |k\rangle = 2\epsilon_k |k\rangle$, donde $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ y H_0 la energía de partícula libre, y consideremos un solo estado ligado: $H_s |m\rangle = E_b |m\rangle$, donde E_b es la energía del estado ligado del canal cerrado, $H_s = H_0 + V_s$, entonces el problema que acopla ambos estados está dado por [Ketterle and Zwierlein, 2008]:

$$H |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle \quad \text{donde:} \quad |\varphi\rangle = \alpha |m\rangle + \sum_k c_k |k\rangle, \quad (3.5)$$

y $H = H_0 + U$, siendo U el potencial de interacción entre átomos. La solución de este problema para un estado ligado $E < 0$ esta dado por la ecuación: $E - E_b = \frac{1}{V} \sum \frac{g_k^2}{E - 2\epsilon_k}$, donde $\langle m|U|k\rangle = g_k/\sqrt{V}$ (V es el volumen); haciendo la aproximación: $g_k \approx g_0$ constante y considerando el límite continuo de estados esta ecuación se convierte en [ibíd]:

$$|E| + E_b = \frac{g_0^2}{V} \int_0^{E_R} \frac{\rho(\epsilon) d\epsilon}{2\epsilon + |E|}, \quad (3.6)$$

donde $\rho(\epsilon)$ es la densidad de estados y $E_R = \hbar/mR^2$ es una energía de corte necesaria para que la integral converja, R se puede considerar como el tamaño aproximado del estado molecular.

Por otra parte, para calcular la longitud de dispersión del problema acoplado es necesario resolver el problema de dos cuerpos con energía positiva $E > 0$, el problema se puede abordar con la matriz- T de la dispersión del par de partículas [Christopher Pethick, 2008]. La idea es utilizar el desarrollo del inverso de la amplitud de dispersión²:

$$\frac{1}{f(k)} \approx -\frac{4\pi\hbar^2}{2m_r} \frac{1}{U_0} + \frac{4\pi\hbar^2}{2m_r} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} + i\alpha}, \quad (3.7)$$

ver ecuación (4.61) del capítulo 4, considerando que la formación del estado ligado molecular con energía E_b produce una interacción efectiva: $U_{ef} = V g_0^2 / (E - E_b)$, de tal manera que en la ecuación anterior se reemplaza: $U_0 \rightarrow U_{ef}$; donde además la energía E se obtiene al resolver la ecuación (3.6), al final se obtiene el siguiente resultado [Ketterle and Zwierlein, 2008]:

$$\frac{1}{f(k)} \approx -\sqrt{\frac{m}{2\hbar^2 E_0}} (\delta_0 - E_b) - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\hbar^2}{m E_0}} k^2 - ik, \quad (3.8)$$

donde: $\delta_0 = (g_0^2/V) \sum_k 1/2\epsilon_k$ y $E_0 = (g_0^2/2\pi)^2 (m/2\hbar^2)^3$, δ_0 representa un corrimiento de la energía E_b debido al acoplamiento del estado molecular y los estados dispersados del continuo, mientras que E_0 es una energía asociada con el factor g_0 . Es importante notar que g_0 es una aproximación de los elementos de matriz del potencial de interacción entre átomos que depende del acoplamiento del momento angular de los átomos (V_T y V_s como se menciono antes). Comparando la ecuación anterior con la expresión: $\frac{1}{f} \approx -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_e k^2 - ik$, ver ecuación (4.69), se obtiene la longitud de dispersión:

¹El factor de 2 en la ecuación de eigenestados se debe que se considera el sistema de dos partículas.

² $U_0 = U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ (0) y m_r es la masa relativa del sistema de dos partículas, si tienen la misma masa: $m_r = m/2$

$$a = \sqrt{\frac{2\hbar^2 E_0}{m}} \frac{1}{\delta_0 - E_b}. \quad (3.9)$$

La figura 3.8 muestra el comportamiento de la energía del estado ligado E y de la longitud de dispersión a , del problema acoplado, como función de $(E_b - \delta_0)/\delta_0$. La resonancia de Feshbach ocurre en la zona donde la longitud dispersión diverge y hace un cambio de signo ($a \rightarrow \pm\infty$), en esta zona la energía del estado ligado varía cuadráticamente con E_b : $E \approx -(E_b - \delta_0)^2/2E_0$ e inversamente con la longitud de dispersión al cuadrado: $E \approx -\hbar^2/2ma^2$; lejos de la zona de la resonancia de Feshbach la energía corresponde a la energía del estado ligado del canal abierto: $E \approx E_b$.

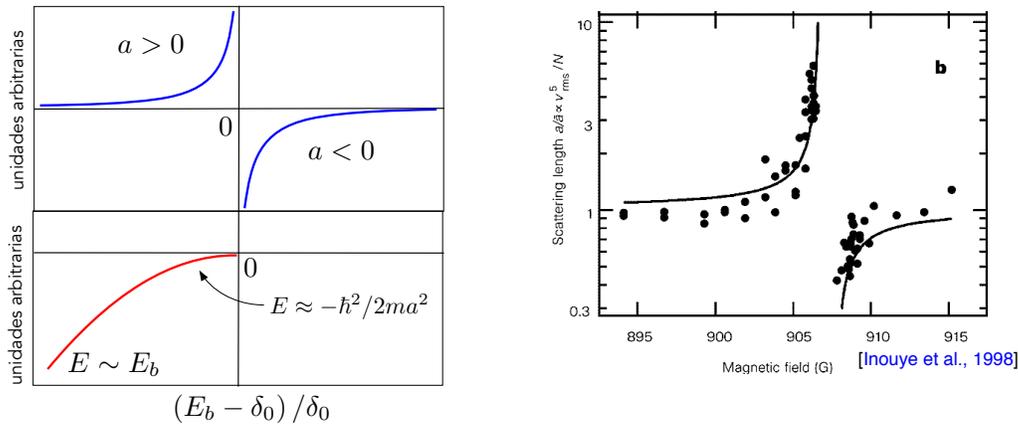


Figura 3.8: Comportamiento de la longitud de dispersión a y energía del estado ligado E del problema acoplado entre el estado ligado y los estados dispersados de un sistema de dos partículas; la figura adjunta muestra los datos experimentales de la longitud de dispersión en función del campo magnético aplicado [Inouye et al., 1998].

El gran logro experimental ha sido poder controlar mediante un campo magnético externo B , que por efecto Zeeman desdoblan los diferentes estados de momento angular de los átomos, la energía del estado ligado E_b y con ello poder varía la longitud de dispersión a así como de la energía E modificando el campo magnético B . Si $\Delta\mu$ es la diferencia del momento magnético entonces [Moerdijk et al., 1995]: $E_b - \delta_0 = \Delta\mu B$, de manera que la longitud de dispersión en función del campo magnético se expresa como [ibíd]:

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right), \quad (3.10)$$

donde B_0 , ΔB son ciertos parámetros del campo magnético aplicado y a_{bg} corresponde a la longitud de dispersión del problema de los dos átomos en el canal abierto (desacoplado). Algunas de las primeras resonancias de Feshbach reportadas en gases atómicos se hicieron en gases de Bose: [Inouye et al., 1998], [Roberts et al., 1998], y posteriormente en gases de Fermi: [Loftus et al., 2002], [O'Hara et al., 2002]; desde entonces han servido para investigar las

propiedades de interacción en sistemas de muchos cuerpos. De esta manera la resonancia de Feshbach ha sido la principal técnica mediante la cual es posible modificar la interacción entre átomos en un gas y ha permitido obtener el crossover en gases de Fermi. En 2003 se reportó la formación de los estado moleculares en un gas atómico de Fermi mediante el uso de la resonancia de Feshbach [C. A. Reagal and Jin, 2004], [Greiner et al., 2003], [Zwierlein et al., 2003].

En la literatura se han reportado diferentes evidencias del crossover en los gases atómicos, entre las más importantes han sido la distribución espacial de partículas o perfiles de densidad y la formación de redes de vórtices en gases rotando. Los perfiles de densidad observados experimentalmente en un gas de Bose se comparan con los obtenidos a través de modelos de un gas interactuante en un potencial de confinamiento vía la ecuación de Gross-Pitaevskii [Schuck and Viñas, 2000] cuyo resultado en la aproximación de Thomas-Fermi coinciden. En la figura 3.9 se muestran diferentes imágenes de los perfiles de densidad reportados experimentalmente y que evidencian el condensado de Bose-Einstein en un gas de Fermi cuando la longitud de dispersión es positiva. La formación de vórtices en gases de Fermi al variar la longitud de dispersión fue reportada en 2005 por el grupo de W. Ketterle [Zwierlein et al., 2005]; la presencia de vórtices en un fluido es evidencia del estado superfluido y que en este caso al observarse en un gas de Fermi al modificar la longitud de dispersión se corrobora la propiedad de superfluididad cuando el gas está en un régimen BCS ($a < 0$) y BEC ($a > 0$).

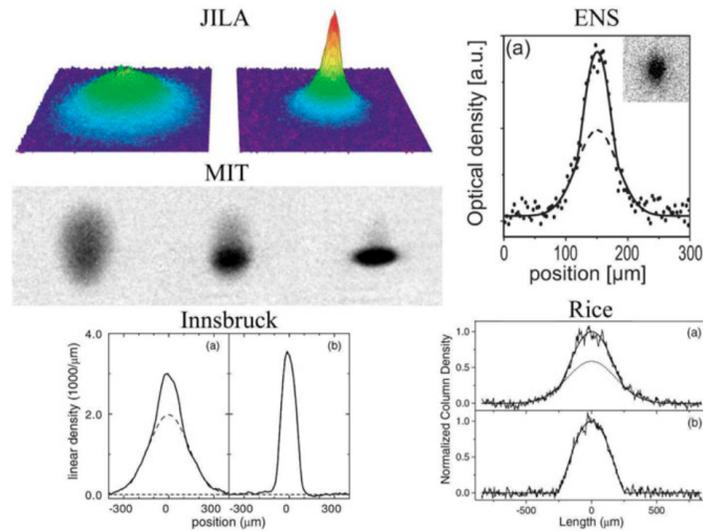


Figura 3.9: Perfiles de densidad en un gas de Fermi cuando la longitud de dispersión es positiva, estos perfiles de densidad verifican el estado de condensado de Bose-Einstein en el gas. La imagen ha sido extraída de [Ketterle and Zwierlein, 2008] y se muestran los resultados de diferentes grupos (JILA) [Greiner et al., 2003], (MIT) [Zwierlein et al., 2003], (ENS) [Bourdelle et al., 2004], (Innsbruck) [Bartenstein et al., 2004] RICE [Chin et al., 2004].

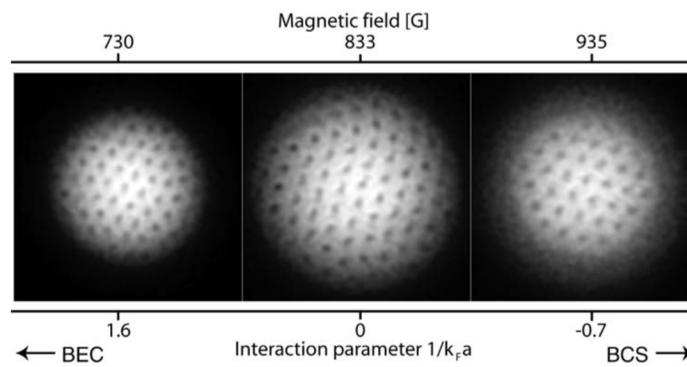


Figura 3.10: Formación de vórtices en un gas de Fermi cerca de la resonancia de Feshbach y que evidencia el estado superfluido en ambos regímenes: gas de Fermi superfluido ($a < 0$) y gas de Bose superfluido ($a > 0$) [Zwierlein et al., 2005].

Parte II
Fundamentos

Interacción entre partículas.

EN este capítulo se hace una revisión de la teoría de dispersión entre pares de partículas poniendo énfasis al concepto de longitud de dispersión. Este parámetro está relacionado con el corrimiento de fase en onda s y en el límite de bajas energías la longitud de dispersión caracteriza la interacción entre pares de partículas por lo que en teoría de muchos cuerpos a bajas temperaturas suele usarse este parámetro en sustitución de un potencial de interacción. Sin embargo, tal como se discutió en el capítulo anterior, en un gas de Fermi el empleo directo de la longitud de dispersión conduce a divergencias en algunas ecuaciones por lo que se emplea un método de renormalización, aquí se describe como se llega a esta ecuación de renormalización.

En este trabajo estamos interesados analizar el gas de Fermi modelando la interacción con diferentes potenciales y en este capítulo se hace una descripción de ellos. Para hacer una comparación con el modelo del crossover de potencial de contacto donde la longitud de dispersión es la variable que describe la interacción, al final del capítulo se hace el cálculo de la longitud de dispersión para los diferentes potenciales de interacción estudiados en este trabajo.

4.1. Sistema de dos partículas.

Consideremos un sistema de dos partículas, de masas m_1 y m_2 , que interactúan a través de un potencial central $U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$, la ecuación de Schrödinger para el sistema de las dos partículas se expresa de la siguiente manera:

$$\left[\frac{\hat{\vec{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\vec{p}}_2^2}{2m_2} - U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \right] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_T \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (4.1)$$

donde E_T corresponde a la energía total de las dos partículas. Al igual que en mecánica clásica, el sistema de dos partículas, se puede separar en dos sistemas independientes: uno que corresponde al movimiento del centro de masa (\vec{R}) y el otro al movimiento de la coordenada relativa (\vec{r}). La definición de ambas coordenadas, así como el de momento lineal del centro de masa (\vec{P}) y relativo (\vec{p}) se describen a continuación:

$$\begin{aligned}\vec{R} &\equiv \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, & \hat{\vec{P}} &\equiv \hat{\vec{p}}_1 + \hat{\vec{p}}_2, & M &\equiv m_1 + m_2, \\ \vec{r} &\equiv \vec{r}_1 - \vec{r}_2, & \hat{\vec{p}} &\equiv \frac{m_1 \hat{\vec{p}}_1 - m_2 \hat{\vec{p}}_2}{m_1 + m_2}, & m_r &\equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.\end{aligned}\quad (4.2)$$

donde m_r corresponde a la masa reducida (para partículas de igual masa m , entonces: $m_r = m/2$). Con esta transformación la ecuación de Schrödinger toma la siguiente expresión:

$$\left[\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} + \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_r} + U(r) \right] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_T \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (4.3)$$

que es posible resolver por separación de variables:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi(\vec{R}) \psi(\vec{r}), \quad (4.4)$$

resultando en el siguiente par de ecuaciones:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\hat{\vec{P}}^2}{2M} \right) \Phi(\vec{R}) &= E_R \Phi(\vec{R}), \\ \left(\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m_r} + U(r) \right) \psi(\vec{r}) &= E_r \psi(\vec{r}),\end{aligned}\quad (4.5)$$

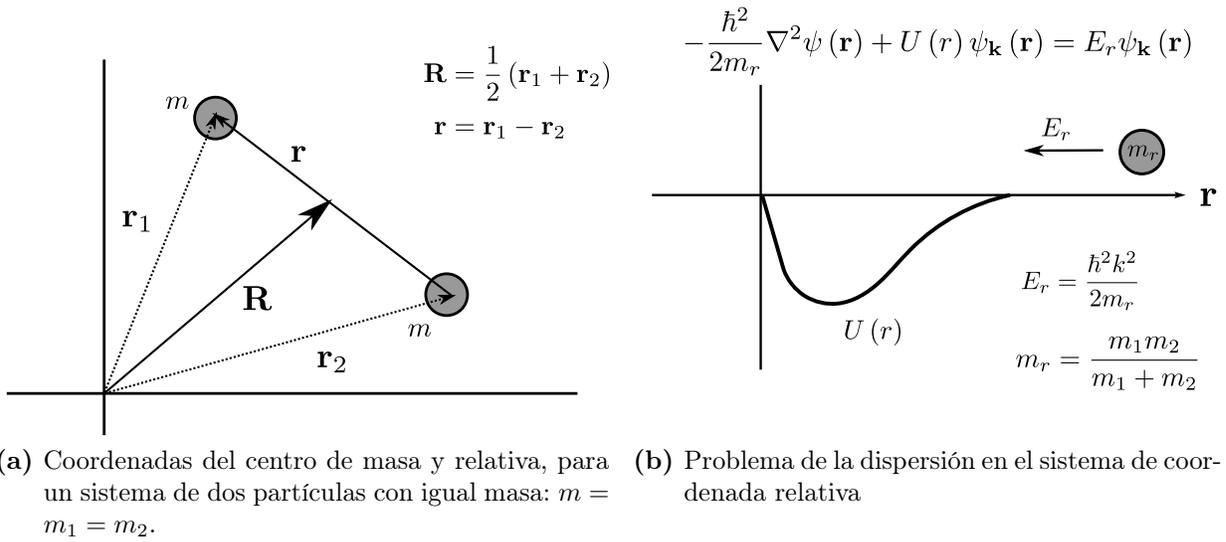
la primera representa el estado del sistema en la coordenada de centro de masa (\vec{R}); mientras que la segunda en la coordenada relativa (\mathbf{r}). La energía total del par de partículas estaba dada por la siguiente relación: $E_T = E_R + E_r$.

4.2. Ecuación radial, corrimientos de fase.

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m_r} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + U(r) \psi(\mathbf{r}) = E_r \psi(\mathbf{r}). \quad (4.6)$$

En el problema de una dispersión se supone conocida la energía de la partícula (de masa reducida m_r):



$$E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}, \quad (4.7)$$

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

La función de onda $\psi(\vec{\mathbf{r}})$, además de satisfacer la ecuación de Schrödinger (4.6), debe cumplir la condición de frontera tal que en el límite asintótico ($r \gg 1$) tenga la siguiente forma:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{r}, \quad r \gg 1; \quad (4.8)$$

donde se ha tomado el eje z al de incidencia de la partícula; el primer término representa una onda plana de momento k -partícula incidente-, más una onda esférica saliente -partícula dispersada- de igual momento pero cuya amplitud varía en la dirección angular¹ con el factor $f(\theta)$, conocido como **amplitud de dispersión**, cuyas unidades son de longitud y en general depende del momento \mathbf{k} de la partícula.

La amplitud de dispersión $f(\theta)$ queda determinada al resolver la ecuación de Schrödinger (4.6) para un potencial $U(r)$ imponiendo la condición de frontera (4.8). Sin embargo, un resultado importante de la teoría de la dispersión establece en que en el régimen de bajas energía la amplitud de dispersión tiene un valor constante y corresponde a la **longitud de dispersión** a (con un signo negativo).

A continuación se presenta el concepto de **corrimientos de fase** δ_l , que dependen del momento angular l de la partícula. La importancia de estos parámetros consiste en que la amplitud de dispersión se puede desarrollar como una suma de diferentes términos -**ondas**

¹En general, la amplitud de dispersión depende del ángulo polar y azimutal: (θ, φ) ; sin embargo para un potencial simétricamente esférico está únicamente depende del ángulo θ .

parciales-, cada uno de los cuales depende de un valor del momento angular l y por lo tanto de δ_l . El resultado principal es que cuando la energía de las partículas es muy pequeña ($k \ll 1$) el término más importante en la dispersión corresponde a $l = 0$, en este caso la amplitud de dispersión contiene un solo término. Esta aproximación se le conoce como de “*onda s*”.

La ecuación de Schrödinger (4.6) para un potencial central se puede resolver por separación de variables [Merzbacher, 1998]: $\psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = R(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$, donde la parte angular corresponde a los armónicos esféricos: $Y_l^m(\theta, \varphi)$, cuyas expresiones son bien conocidas y que son eigenfunciones del operador de momento angular $\hat{\mathbf{L}}$ y de su proyección \hat{L}_z : $\hat{\mathbf{L}}^2 Y_l^m = l(l+1) Y_l^m$, $\hat{L}_z Y_l^m = m Y_l^m$, y que están determinados por los valores del momento angular l y de su proyección m . Por lo tanto solo es necesario resolver la parte radial de la ecuación de Schrödinger que contiene la dependencia con el potencial $U(r)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_r r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_r} \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) \right] R_l(r) = E_r R_{l,k}(r). \quad (4.9)$$

Es usual escribir esta ecuación de dos maneras:

- 1 Haciendo el cambio de variable: $\rho = r \sqrt{2m_r E / \hbar^2}$, donde: $\hbar^2 k = \sqrt{2m_r E}$, la ecuación diferencial se puede expresar como:

$$\rho^2 \frac{d^2 R_{l,k}}{d\rho^2} + 2\rho \frac{dR_{l,k}}{d\rho} + \left[\rho^2 - l(l+1) - U_r(r) \right] R_{l,k} = 0. \quad (4.10)$$

donde se define: $U_r = 2m_r U / \hbar^2$.

- 2 Haciendo el cambio de variable: $R_{l,k}(r) = u_{l,k}(r) / r$ y dividiendo por las constantes adecuadas, toma la siguiente forma:

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m_r}{\hbar^2} U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_{l,k}(r) = k^2 u_{l,k}(r); \quad (4.11)$$

cuando $U(r) = 0$, la ecuación corresponde a la ecuación diferencial de Bessel con índice entero positivo l cuyas soluciones son las funciones esféricas de Bessel. Las soluciones $u_{l,k}$, dependen de los parámetros k y l que están relacionados con la energía y el momento angular de la partícula, la ecuación (4.11) es equivalente a la de Schrödinger unidimensional para una partícula en el potencial efectivo: $U_{\text{efec}}(r) = 2m_r U(r) / \hbar^2 + l(l+1) / r^2$, que incluye el potencial centrífugo ($l(l+1) / r^2$). De manera efectiva, el potencial centrífugo representa una barrera de potencial en la proximidad del alcance del potencial “real” $U(r)$; si la energía de la partícula es pequeña (límite de baja energía, $k \approx 0$) la partícula es incapaz de atravesar esta barrera y en este caso el potencial de interacción $U(r)$ puede ser despreciado. Así, en el límite de bajas energías la dispersión esta determinada principalmente por el valor $l = 0$.

La condición de frontera para las soluciones $u_{l,k}(r)$ es se anulen en el origen:

$$u_{l,k}(r=0) = 0. \quad (4.12)$$

Supongamos un potencial $U(r)$ de alcance finito r_0 o tal que se puede despreciar para $r > r_0$, entonces la ecuación diferencial radial (4.11) lejos del alcance del potencial esta dada por:

$$\frac{d^2 u_{l,k}(r)}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_{l,k}(r) = 0, \quad r > d \quad (4.13)$$

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

$$u_{l,k}(r) = B_l r j_l(kr) + C_l r n_l(kr), \quad r > d; \quad (4.14)$$

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

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\approx \frac{1}{kr} \operatorname{sen} \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right), \\ n_l(kr) &\approx -\frac{1}{kr} \cos \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right), \end{aligned} \quad kr \gg 1 \quad (4.15)$$

Sustituyendo estas aproximaciones en (4.14), se obtiene:

$$u_{l,k}(r) \approx B_l \frac{\operatorname{sen} \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{k} - C_l \frac{\cos \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{k}, \quad kr \gg 1. \quad (4.16)$$

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

$$R_{l,k}(r) \equiv \frac{u_{l,k}}{r} \approx B_l \frac{\operatorname{sen} \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{kr} - C_l \frac{\cos \left(kr - \frac{l\pi}{2} \right)}{kr} = \frac{\operatorname{sen} \left(kr - l\pi/2 + \delta_l \right)}{kr}, \quad kr \gg 1. \quad (4.17)$$

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

$$\begin{aligned} B_l &= \cos \delta_l, \\ C_l &= -\operatorname{sen} \delta_l, \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \tan \delta_l = -\frac{C_l}{B_l}, \quad (4.18)$$

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

$$R_{l,k}(r) \equiv \frac{u_{l,k}}{r} \approx j_l(kr) \cos \delta_l - n_l(kr) \operatorname{sen} \delta_l, \quad kr \gg 1. \quad (4.19)$$

Al conocer el corrimiento de fase δ_l queda completamente determinada la solución $R_{l,k}(r)$. Una manera para determinar los corrimientos de fase δ_l consiste en calcular la derivada logarítmica de la función $R_{l,k}(r)$ y evaluar en un alcance r_0 , que puede ser el valor a partir del cual el potencial de interacción se anula (por ejemplo en el pozo cuadrado) o en dado caso tomar el límite $r_0 \rightarrow \infty$ para un potencial mas “suave”. Se define entonces $\gamma(k, r_0)$ como la derivada logarítmica de la función radial:

$$\gamma(k, r_0) \equiv \left. \frac{d}{dr} \ln [R_{l,k}(r)] \right|_{r=r_0} = \left. \frac{R'_{l,k}(r)}{R_{l,k}(r)} \right|_{r=r_0}, \quad (4.20)$$

que se puede calcular directamente de la ecuación (4.19) obteniendo la siguiente expresión:

$$\gamma(k, r_0) = k \frac{j'_l(kr_0) \cos \delta_l + n'_l(kr_0) \operatorname{sen} \delta_l}{j_l(kr_0) \cos \delta_l - n_l(kr_0) \operatorname{sen} \delta_l}, \quad (4.21)$$

a partir de la cual se obtiene la siguiente expresión:

$$\tan \delta_l = \frac{k j'_l(kr_0) - \gamma(k, r_0) j_l(kr_0)}{\gamma(k, r_0) n_l(kr_0) - k n'_l(kr_0)}, \quad (4.22)$$

Formalmente esta expresión se puede calcular de la siguiente manera: primero se resuelve la ecuación radial para un potencial de interacción modelo obteniendo las funciones $R_{l,k}(r)$, a partir de estas funciones se calcula $\gamma(k, r_0)$ y se sustituye en (4.22), finalmente se toma el límite $r_0 \rightarrow \infty$. En el límite de bajas energías ($kr \ll l$), usando las aproximaciones asintóticas de las funciones de Bessel y Neumann en la ecuación (4.22) se obtiene la siguiente expresión² [Afnan, 2011] [Roman, 1965]:

$$\tan \delta_l \approx \frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \frac{l - \gamma r_0}{l + 1 + \gamma r_0} \quad \text{bajas energías } (kr \ll l). \quad (4.23)$$

De esta expresión se puede notar que en el límite de bajas energías los corrimientos de fase son proporcionales a potencias de k : $\tan \delta_l \propto k^{2l+1}$, y por lo tanto el término más importante es con $l = 0$, conocido como onda s , en cuyo caso:

$$\tan \delta_0 \approx -k \frac{\gamma r_0^2}{1 + \gamma r_0}. \quad (4.24)$$

Como veremos a continuación, en este caso el corrimiento de fase δ_0 permite definir una cantidad con mayor sentido físico en el problema de dispersión conocida como longitud de dispersión.

²En [Roman, 1965] se define: $\beta_l = \frac{r_0}{R_{l,k}(r)} \frac{dR_{l,k}(r)}{dr}$, en este caso la ecuación (4.22) se expresa como:

$$\tan \delta_l \approx \frac{1}{(2l+1)} \left(\frac{2^l l!}{(2l)!} \right)^2 \frac{l - \beta_l}{l + 1 + \beta_l} (ka)^{2l+1}$$

4.3. Límite de bajas energías, longitud de dispersión.

De la ecuación de Schrödinger radial (4.11) para onda s ($l = 0$) tomando el límite de bajas energías ($k \rightarrow 0$) se obtiene la siguiente ecuación:

$$u_0''(r) - U_0(r) u_0(r) = 0, \quad k \rightarrow 0, \quad (l = 0). \quad (4.25)$$

En la región fuera del alcance del potencial ($U \approx 0$), se obtiene: $u_0''(r) = 0$, cuya solución es la recta:

$$u_0(r) = Br + C. \quad (4.26)$$

La pendiente B cruza el eje r en $-C/B$. Esta solución $u_0(r)$ tiene que coincidir con la solución asintótica (4.16) (con $l = 0$, y límite de bajas energías $k \sim 0$) por lo tanto los coeficientes de ambas soluciones deben ser los mismos: $B = B_0$, $C = -C_0/k$. De la ecuación (4.18) se obtiene: $\tan \delta_0 = -C_0/B_0$, es decir, se puede escribir la siguiente relación:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0}{k} = -\frac{C_0}{k B_0} = \frac{C}{B}, \quad (4.27)$$

por lo tanto, en el límite $k \rightarrow 0$, la razón: $\tan \delta_0/k$ toma un valor constante (independiente de k). Se define entonces la **longitud de dispersión** [Roman, 1965]:

$$a \equiv -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0}{k}. \quad (4.28)$$

La longitud de dispersión corresponde al valor del punto donde la recta (4.26) cruza el eje, lo cual tiene una interpretación respecto del signo de la longitud de dispersión. De la ecuación de la recta es claro que puede cruzar al eje r en el semieje positivo o negativo y por lo tanto la longitud de dispersión puede tomar tanto valores positivos como negativos. Si notamos además de la ecuación (4.25), se obtiene: $u_0''/u_0 = U_0$, es decir, la curvatura de la solución $u_0(r)$ esta determinada por el signo del potencial. Para un potencial de interacción repulsivo $U_0 > 0$ la curvatura de u_0 es positiva y la recta corta al eje r en el lado positivo, por lo tanto la longitud de dispersión es positiva $a > 0$. Para un potencial de interacción atractivo la longitud de dispersión puede ser positiva o negativa. En este caso la curvatura de u_0 es negativa y se pueden tener dos posibilidades de acuerdo a lo mostrado en la figura 4.1.

$$\begin{array}{l} \text{potencial atractivo: } U < 0 \\ \text{potencial repulsivo: } U > 0 \end{array} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{sin estado ligado: } a < 0, \\ \text{estado ligado: } a > 0, \\ a > 0. \end{array} \right. \quad (4.29)$$

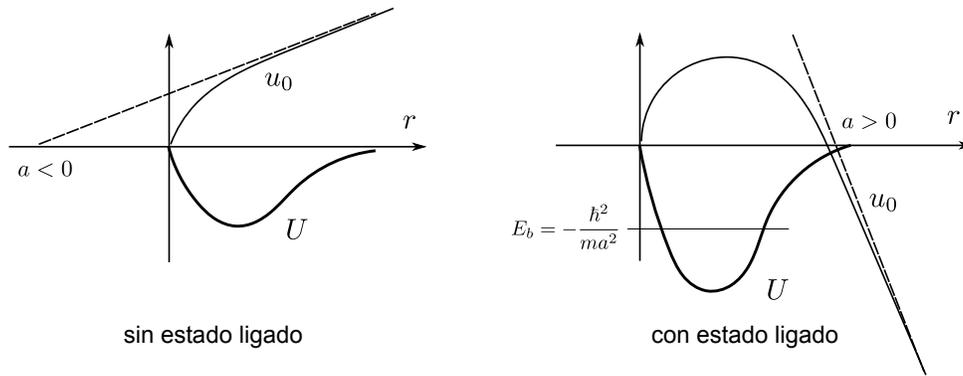


Figura 4.1: Longitud de dispersión para un potencial atractivo, cuando la profundidad del potencial es débil la longitud de dispersión es negativa, pero conforme la profundidad del potencial aumenta la longitud de dispersión es capaz de cambiar de signo.

Si la magnitud del potencial es débil, la curvatura de la función u_0 es tal que no hay un cambio de signo en la derivada y la recta corta al eje r en el semieje negativo y por lo tanto la longitud de dispersión es negativa: $a < 0$. Por el contrario, si la profundidad del potencial U_0 es mayor entonces la curvatura de u_0 cambia el signo en la derivada y la recta corta al eje r en el semieje positivo con lo cual la longitud de dispersión es positiva $a > 0$. Este caso, se puede demostrar, corresponde a un estado ligado s ($l = 0$) [Roman, 1965, pp. 177].

La posibilidad experimental de modificar externamente la longitud de dispersión en un gas de Fermi, realizada desde principios de siglo, ha permitido observar el fenómeno del crossover BCS-BEC. Sin embargo, por lo discutido antes, dado un potencial de interacción modelo entre partículas, la modificación de la longitud de dispersión es equivalente a variar la profundidad del potencial de interacción. La idea del presente trabajo es modelar la interacción mediante algunos potenciales que dependen de dos parámetros: un alcance R y una profundidad V_0 , entonces el crossover se puede describir haciendo variar la profundidad del potencial.

Como se discute en el capítulo 5, el hamiltoniano del gas de Fermi depende directamente de los parámetros del potencial de interacción (V_0 , R) a través de la transformada de Fourier del potencial y por lo tanto este esquema del crossover es más “adecuado”, sin embargo también es posible hacer una correspondencia con la longitud de dispersión calculándola para cada potencial, ver sección 4.3. En el modelos del Leggett [Leggett, 1980] del crossover la longitud de dispersión se introduce a través del empleo de un potencial de contacto con un término de renormalización y en la sección 4.5 se discute a detalle.

4.4. Desarrollo en ondas parciales.

En esta sección se muestra como es posible relacionar la longitud de dispersión con la amplitud de dispersión, esta relación es importante ya que la amplitud de dispersión se puede expresar en términos de la transformada de Fourier del potencial de interacción mismo que aparece en el

hamiltoniano del gas de Fermi. Para un potencial de interacción central es posible desarrollar la función de onda $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ en términos de las soluciones radiales y angulares³, $R_{l,k}(r) P_l(\cos\theta)$:

$$\psi_{\vec{\mathbf{k}}}(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_l a_l R_{l,k}(r) P_l(\cos\theta), \quad (4.30)$$

al emplear la aproximación asintótica de las soluciones radiales $R_{l,k}(r)$ (ecuación (4.17) en forma compleja) se obtiene lo siguiente:

$$\psi_{\mathbf{k}} \approx \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_l a_l (-i)^l e^{i\delta_l} P_l(\cos\theta) - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_l a_l (i)^l e^{-i\delta_l} P_l(\cos\theta), \quad kr \gg 1. \quad (4.31)$$

Por otra parte, sustituyendo el siguiente desarrollo de una onda plana (formula de Bauer [Roman, 1965, pp. 162]):

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos\theta} = \sum_l^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta), \quad (4.32)$$

en la solución asintótica de la dispersión, ecuación (4.8), se obtiene lo siguiente:

$$\psi_{\mathbf{k}} \approx \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_l (2l+1) (-1)^l P_l(\cos\theta) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (4.33)$$

Comparando las ecuaciones (4.31) y (4.33), se obtienen los coeficientes a_l de la ecuación 4.30: $a_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l}$, de donde se obtiene el siguiente resultado para la amplitud de dispersión:

$$f(k, \theta) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta), \quad (4.34)$$

donde $f_l(k) = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = e^{i\delta_l} \text{sen } \delta_l$. De esta forma la amplitud de dispersión se puede determinar a partir de los corrimientos de fase δ_l .

En el límite de bajas energías el término con $l = 0$ es el que contribuye de manera más significativa para la amplitud de dispersión $f(\theta)$. De la ecuación 4.34 se obtiene:

$$f \approx \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \text{sen } \delta_0 = \frac{(e^{i2\delta_0} - 1)}{2ik} = \frac{1}{k \cot \delta_0 - ik}, \quad k \approx 0. \quad (4.35)$$

En este límite ($k \approx 0$), de la ecuación (4.24) se obtiene: $\tan \delta_0 \sim k$ y por lo tanto δ_0 tiene un valor pequeño; entonces se puede hacer las siguientes aproximaciones: $\text{sen } \delta_0 \approx \tan \delta_0$ y $e^{i\delta_0} \approx 1$. Con esto, se obtiene la siguiente expresión para la amplitud de dispersión:

$$f \approx \frac{\tan \delta_0}{k} \quad k \approx 0, \quad (4.36)$$

³En el caso del potencial central $U(r)$ los armónicos esféricos $Y_l^m(\theta, \varphi)$ se reducen a los polinomios de Legendre $P_l(\cos\theta)$.

comparando con la ecuación (4.28), que define la longitud de dispersión, se obtiene que la amplitud de dispersión coincide con la longitud de dispersión en el límite de bajas energías.

$$f \approx -a, \quad k \approx 0. \quad (4.37)$$

En este caso, de la ecuación (4.8), se obtiene que la función de onda esta dada por la expresión:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim e^{ikz} - \frac{a}{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (r \gg 1). \quad (4.38)$$

En la siguiente sección se muestra como es posible escribir una ecuación iterativa para la amplitud de dispersión en términos de la transformada de Fourier del potencial de interacción.

4.5. Amplitud de dispersión, matriz T .

La ecuación de Schrödinger en su forma integral, conocida como *ecuación de Lippmann-Schwinger*, se expresa de la siguiente forma [Roman, 1965]:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \frac{2m_r}{\hbar^2} \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}', \quad (4.39)$$

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

$$(\nabla^2 + k^2) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0, \quad (4.40)$$

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

$$(\nabla^2 + k^2) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\delta(\vec{r}). \quad (4.41)$$

La ecuación de Lippmann-Schwinger permite establecer una solución mediante una serie iterativa (*Serie de Born*) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = & \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \frac{2m_r}{\hbar^2} \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(r') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' + \\ & + \left(\frac{2m_r}{\hbar^2} \right)^2 \int \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') U(r'') G(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') U(r') \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}'') d^3\mathbf{r}' d^3\mathbf{r}'' + \dots \end{aligned} \quad (4.42)$$

En el problema de dispersión de un par de partículas que interactúan a través de un potencial, $U(r)$, se puede demostrar que la función de Green tiene la siguiente expresión [Roman, 1965]: $G(\vec{r}) = e^{ikr}/4\pi r$, como solución de la ecuación homogénea (4.40) se pueden elegir las funciones de partícula libre: $\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. Tomando como eje z al de la trayectoria de la partícula incidente, la ecuación de Lippmann-Schwinger se escribe como:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \frac{2m_r}{\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \quad (4.43)$$

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

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \frac{2m_r}{\hbar^2} \frac{e^{ir}}{r} \int e^{-ik'\cdot\vec{r}'} U(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}', \quad r \gg 1; \quad (4.44)$$

que comparando con la ecuación (4.8), se obtiene la siguiente expresión para la amplitud de dispersión como:

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m_r}{\hbar^2} \int e^{-ik'\cdot\vec{r}'} U(r') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}'. \quad (4.45)$$

que formalmente se expresa como:

$$f_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m_r}{\hbar^2} \langle \phi_{\vec{k}'} | U | \psi_{\vec{k}} \rangle, \quad (4.46)$$

donde $|\phi_{\vec{k}}\rangle$ son eigenestados del operador Hamiltoniano de partícula libre⁴:

$$\hat{H}_0 |\phi_{\vec{k}}\rangle = \epsilon_{\vec{k}} |\phi_{\vec{k}}\rangle, \quad \epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}. \quad (4.47)$$

mientras que los estados $|\Psi_{\vec{k}}\rangle$ son las eigenfunciones del Hamiltoniano total: $\hat{H} = \hat{H}_0 + U$, con energía $E_{\vec{k}}$:

$$\hat{H} |\Psi_{\vec{k}}\rangle = E_{\vec{k}} |\Psi_{\vec{k}}\rangle. \quad (4.48)$$

La ecuación de Lippmann-Schwinger se puede expresar formalmente como:

$$|\Psi_{\vec{k}}\rangle = |\phi_{\vec{k}}\rangle + \hat{G}_0 U |\Psi_{\vec{k}}\rangle, \quad (4.49)$$

donde el operador \hat{G}_0 está dado por: $\hat{G}_0 = (E_{\vec{k}} - \hat{H}_0 + i\alpha)^{-1}$, el parámetro α es una cantidad real positiva necesaria para evitar las singularidades del operador y se debe tomar el límite: $\alpha \rightarrow 0$. Este operador tiene como eigenestados a $|\phi_{\vec{k}}\rangle$:

$$\hat{G}_0 |\phi_{\vec{k}}\rangle = (E_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}} + i\alpha)^{-1} |\phi_{\vec{k}}\rangle, \quad (4.50)$$

Definiendo el **operador- T** a través de la siguiente relación:

$$U |\Psi_{\vec{k}}\rangle = T_{\vec{k}} |\phi_{\vec{k}}\rangle, \quad (4.51)$$

⁴Es importante notar que se emplea la masa reducida m_r en los estados de energía ya que corresponde al sistema reducido de un sistema de dos partículas; a diferencia del análisis que se hace del hamiltoniano del gas de fermiones, donde los estados de energía están dados por la masa de los fermiones individuales, ver ecuación (5.2).

entonces, de la amplitud de dispersión ecuación (4.46), se puede escribir de la siguiente manera:

$$f_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m_r}{\hbar^2} \langle \phi_{\vec{k}'} | T_{\mathbf{k}} | \phi_{\vec{k}} \rangle = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m_r}{\hbar^2} T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}, \quad (4.52)$$

de esta manera que los elementos del operador- T , conocido como **matriz- T** , corresponde a los elementos de la amplitud de dispersión $f_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$. Para determinar los elementos de la matriz- T o de la amplitud de dispersión se suele emplear un método iterativo como se muestra a continuación.

De las ecuaciones (4.49) y (4.51) se obtiene: $|\Psi_{\vec{k}}\rangle = |\phi_{\vec{k}}\rangle + \hat{G}_0 T_{\mathbf{k}} |\phi_{\vec{k}}\rangle$, multiplicando por U en ambos lados de la ecuación y empleando la definición del operador- T se llega a la siguiente ecuación: $T_{\mathbf{k}} |\phi_{\vec{k}}\rangle = U |\phi_{\vec{k}}\rangle + U \hat{G}_0 T_{\mathbf{k}} |\phi_{\vec{k}}\rangle$, que permite determinar los elementos de la matriz- T :

$$\langle \phi_{\mathbf{k}'} | T_{\mathbf{k}} | \phi_{\vec{k}} \rangle = \langle \phi_{\mathbf{k}'} | U | \phi_{\vec{k}} \rangle + \langle \phi_{\mathbf{k}'} | U \hat{G}_0 T_{\mathbf{k}} | \phi_{\vec{k}} \rangle, \quad (4.53)$$

es decir:

$$T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}''} \frac{U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} T_{\mathbf{k}''\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}''} + i\alpha}. \quad (4.54)$$

De igual manera se obtiene los elementos de la amplitud de dispersión⁵:

$$f_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m_r}{\hbar^2} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}''} \frac{U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} f_{\mathbf{k}''\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}''} + i\alpha} \quad (4.55)$$

Esta ecuación integral, tipo Lippmann-Schwinger, permite calcular a la amplitud de dispersión de manera iterativa. La primer aproximación, que considera solamente el primer término (*aproximación de Born*), la amplitud de dispersión corresponde a la transformada de Fourier del potencial:

$$f_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{(1)} = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m_r}{\hbar^2} \langle \phi_{\vec{k}'} | T_{\mathbf{k}} | \phi_{\vec{k}} \rangle = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m_r}{\hbar^2} \langle \phi_{\vec{k}'} | U | \phi_{\vec{k}} \rangle = -\frac{m}{4\pi\hbar^2} \tilde{U}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}; \quad (4.56)$$

(en la última igualdad se ha considerado la masa reducida: $m_r = m/2$) en general, aún en esta aproximación, la amplitud de dispersión depende de \mathbf{k}' y \mathbf{k} , pero si se considera una colisión elástica: $k' = k$, entonces solo depende de k . Si además se considera el límite de bajas energías: $k, k' \rightarrow 0$; por una parte, la amplitud de dispersión es igual a la longitud de dispersión: $f = -a$, ecuación (4.37) y por otra parte la transformada de Fourier es independiente de k, k' : $U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \rightarrow U_0$, juntando ambos resultados se obtiene una relación entre la longitud de dispersión con la transformada de Fourier del potencial de interacción:

$$-a = -\frac{m}{4\pi\hbar^2} U_0, \quad \Rightarrow \quad U_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}; \quad (\text{primer orden, bajas energías}). \quad (4.57)$$

⁵Notar que la correspondencia es uno a uno entre los elementos de ambas matrices: $f_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ y $T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$, excepto el factor constante).

Esta expresión permite introducir la longitud de dispersión al hamiltoniano del gas de Fermi como parámetro que regula la interacción; sin embargo, esta aproximación conlleva a una divergencia en la ecuación del gap, ver ecuación (5.53), por lo que es necesario considerar el siguiente término en el desarrollo de la amplitud de dispersión. Para ello es importante notar que la amplitud de dispersión depende de \mathbf{k} y \mathbf{k}' , ver ecuación (4.55). Cómo la suma en esta ecuación contiene a \mathbf{k}'' para aplicar el límite de bajas energías primero es necesario considerar que la amplitud de dispersión solo depende de k , es decir: $f_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \rightarrow f(k)$, que sale de la suma y lo mismo podemos considerar para: $U_{\mathbf{k}''\mathbf{k}} \rightarrow U(k)$ que también sale de la suma, por lo tanto:

$$f(k) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m_r}{\hbar^2} U(k) + U(k) f(k) \sum_{\mathbf{k}''} \frac{1}{E_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}''} + i\alpha}, \quad (4.58)$$

considerando ahora el límite de bajas energías ($k \rightarrow 0$): $U(k) \rightarrow U_0$, $f(k) \rightarrow -a$, $E_{\mathbf{k}} \sim k^2 \rightarrow 0$, se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_0} = \frac{1}{4\pi a} \frac{2m_r}{\hbar^2} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (4.59)$$

Es importante notar que: $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m_r$ y por lo tanto, en el caso de partículas de igual masa ($m_r = m/2$):

$$\frac{1}{U_0} = \frac{m}{4\pi a \hbar^2} - \frac{m}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{k^2}. \quad (4.60)$$

Esta última ecuación es el fundamento teórico de la **renormalización** empleada por Leggett [Leggett, 1980] al abordar el problema del crossover del gas de fermiones, el término $\sum_{\mathbf{k}} 1/k^2$ diverge, sin embargo esta divergencia es precisamente la que anula la divergencia que aparece en el problema de muchos cuerpos en un gas de Fermi (esto se discuten en el capítulo 5). Este procedimiento de **renormalización** empleado por Leggett consiste en una forma de “modelar” la interacción entre partículas y suele referirse como una interacción de potencial de contacto ya que la expresión (4.57) es equivalente a considerar que la interacción entre partículas se hace a través de un potencial delta de Dirac, aunque es importante decir que es necesario además emplear una aproximación a segundo orden de la amplitud de dispersión.

Una ecuación útil para la amplitud de dispersión, que permite determinar la longitud de dispersión como se describe más adelante, se obtiene a partir de la ecuación (4.55) considerando las aproximaciones: $f_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \approx f(k)$ y $U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \approx U_0$, en cuyo caso $f_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ sale de la suma y se obtiene:

$$\frac{1}{f(k)} \approx -\frac{4\pi\hbar^2}{2m_r} \frac{1}{U_0} + \frac{4\pi\hbar^2}{2m_r} \frac{1}{U_0} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{U(\mathbf{k}')}{E_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} + i\alpha}, \quad (4.61)$$

que al determinar U_0 y la suma (en el límite una integral) $\sum_{\mathbf{k}'} \frac{U(\mathbf{k}')}{E_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'} + i\alpha}$, es posible hacer un desarrollo en potencia de k que al comparar con la ecuación (4.60) se obtiene la longitud de dispersión.

4.6. Potenciales de interacción modelo.

Para describir la interacción entre partículas en el gas de Fermi en este trabajo se proponen cinco potenciales centrales que se pueda expresar de la forma: $U(r) = V_0 f(r/R)$, donde V_0 y R son dos parámetros con dimensiones de energía y longitud y representan de manera efectiva la profundidad y alcance del potencial, respectivamente. Podemos dividir estos cinco potenciales en tres potenciales atractivos: pozo de potencial, potencial exponencial y potencial de Yukawa y dos potenciales que tienen una parte atractiva y una contribución repulsiva que modela un potencial tipo molecular, estos potenciales son el potencial dipolar, que decae como $1/r^3$, y potencial van der Waals, que decae como $1/r^3$. Los potenciales se definen de la siguiente manera:

$$\text{pozo de potencial} \quad U_{\text{sw}}(r) = \begin{cases} -V_0 & r \leq R \\ 0 & r \geq R \end{cases},$$

$$\text{potencial exponencial (Rarita)} \quad U_{\text{exp}}(r) = -V_0 e^{-r/R}, \quad (4.62)$$

$$\text{potencial de Yukawa} \quad U_{\text{Yuk}}(r) = -\frac{V_0}{r} e^{-r/R}.$$

$$\text{potencial dipolar con barrera} \quad U_{\text{dip}}(r) = \begin{cases} V_b & r \leq R \\ -V_0 \frac{R^3}{r^3} & r \geq R \end{cases}, \quad (4.63)$$

$$\text{potencial van der Waals con barrera} \quad U_{\text{vdW}}(r) = \begin{cases} V_b & r \leq R \\ -V_0 \frac{R^6}{r^6} & r \geq R \end{cases}.$$

Una de las conveniencias de emplear estos potenciales consiste en la posibilidad de calcular la integral sobre el ángulo sólido de la transformada de Fourier: $\int U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d\Omega_{\mathbf{k}}$, esta integral como se muestra en el capítulo 6 forma parte del integrando del sistema de ecuaciones por resolver, ver ecuaciones (6.7) y (6.11). Esta integral para los potenciales modelo no diverge y se puede calcular de manera analítica, durante el desarrollo del presente trabajo se probaron diferentes potenciales de interacción (Pöschl–Teller, Saxon-Woods, etc.) algunos de los cuales presentaron dificultades numéricas, al final los cinco potenciales expuestos aquí han permitido, por una parte, obtener resultados numéricos satisfactorios y además mostraron un contraste en la física del crossover BCS-BEC tanto en la termodinámica como en las funciones de pares.

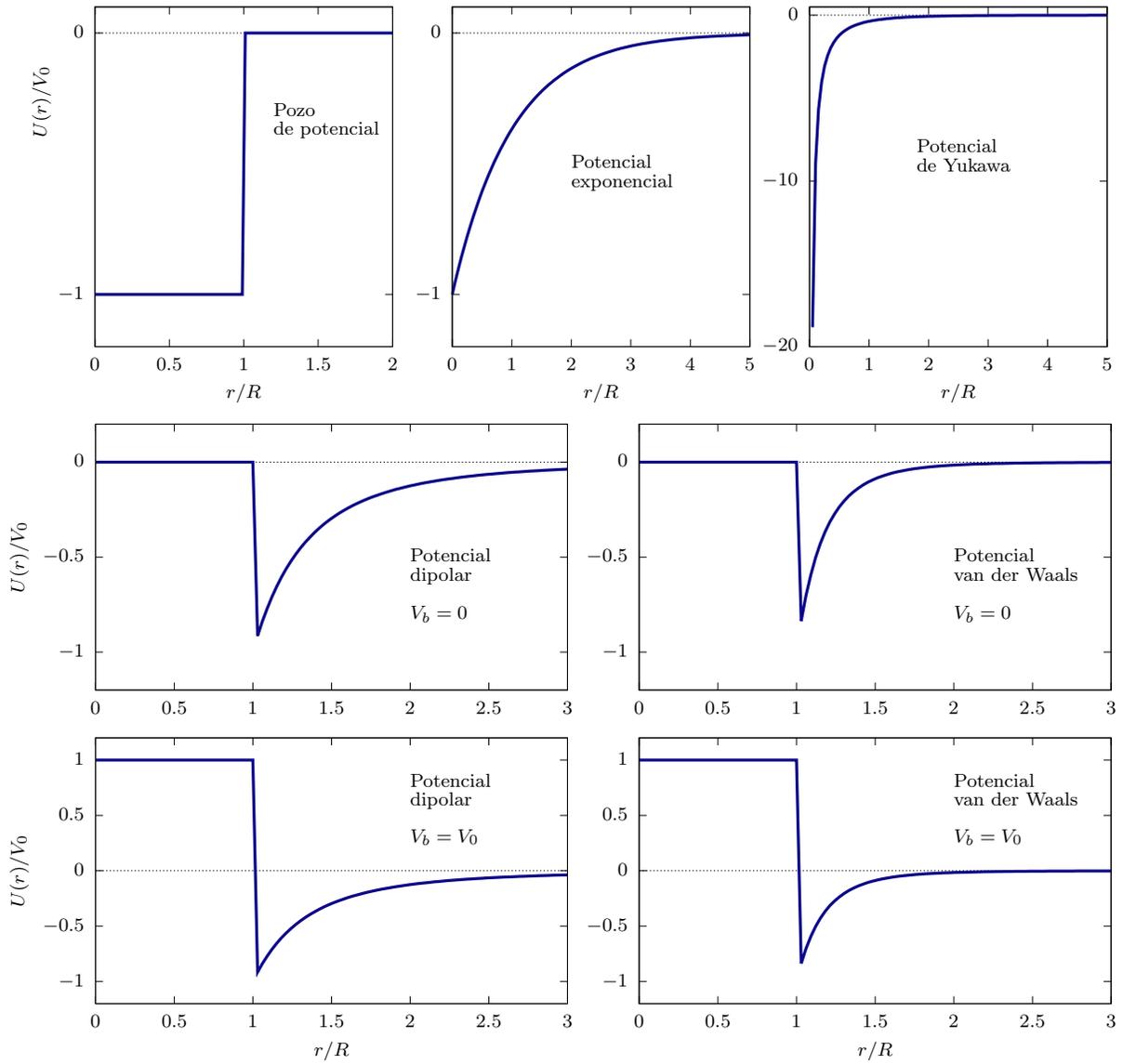


Figura 4.2: Potenciales de interacción modelo estudiados en este trabajo.

El pozo de potencial es el modelo más sencillo para describir una interacción atractiva entre partículas, mientras que el potencial exponencial o de Rarita ha sido empleado en el contexto de la teoría del crossover BCS-BEC en un trabajo previo [Caballero-Benítez et al., 2013], que en gran parte ha motivado el presente trabajo este trabajo. El potencial exponencial fue estudiado por Rarita al analizar las interacciones nucleares [Rarita and Present, 1937] y en este mismo trabajo se reporta la expresión analítica de la longitud de dispersión del potencial exponencial. Por otra parte el potencial de Yukawa, difiere de los dos potenciales anteriores, respecto que diverge cuando $r \rightarrow 0$; sin embargo, la integral $\int U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d\Omega_{\mathbf{k}}$ no lo hace y es por ello

que se incluye este potencial, además de ser un potencial muy empleado en física nuclear y en teoría de muchos cuerpos este potencial es una modificación ad hoc del potencial de Coulomb [Philip L Taylor, 2002] que evita las divergencias comunes del análisis de muchos cuerpos.

En gases, como es bien sabido, la interacción entre partículas, ya sean átomos o moléculas, es atractiva a largo alcance y repulsiva a cortas distancias. Para modelar este tipo de *potenciales atómicos* se propone dos tipos de potencial: potencial dipolar, con una dependencia $1/r^3$ y potencial van der Waals con una dependencia $1/r^6$, para ambos potenciales se agrega una barrera de potencial finita positiva: V_b , que representa la parte repulsiva de la interacción. La intensidad o altura de la parte repulsiva, V_b , en principio se puede considerar como un parámetro adicional, sin embargo para simplificar⁶ se consideran dos casos: $V_b = 0$ y $V_b = V_0$, en la figura 4.2 se muestran los diferentes potenciales estudiados en este trabajo.

4.7. Longitud de dispersión, potenciales modelo.

De acuerdo a la ecuación (4.28), la longitud de dispersión se define como:

$$a \equiv - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0}{k}, \quad (4.64)$$

Para calcular longitud de dispersión de un potencial de interacción la idea general consiste en resolver la ecuación radial (4.9) para $l = 0$ e imponer las condiciones de frontera: que las soluciones no diverjan en $r = 0$ y que en $r \rightarrow \infty$ la solución decaiga y tienda a cero. Esta última condición se compara con las soluciones asintóticas (4.19) con lo cual es posible determinar el corrimiento de fase δ_0 y en principio una expresión para la longitud de dispersión. Sin embargo aquí se presenta el cálculo de la longitud de dispersión empleando la ecuación (4.24) que comparando con la definición de la longitud de dispersión se obtiene:

$$a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0}{k} = \lim_{k \rightarrow 0} \left(\frac{\gamma r_0^2}{\gamma r_0 + 1} \right). \quad (4.65)$$

donde γ viene dada por la ecuación (4.20) y r_0 puede ser un alcance a partir del cual el potencial de interacción estrictamente se anula o si no es el caso se debe tomar el límite $r_0 \rightarrow \infty$. En esta expresión $\gamma(k, r_0)$ se calcula a partir de la solución $R_{0,k}(r)$ de la ecuación (4.9) para un potencial de interacción $U(r)$. También es posible calcular γ en términos de la función: $u_{0,k}(r) = r \cdot R_{l,k}(r)$, en cuyo caso el resultado es el siguiente:

$$\gamma(k, r_0) = \frac{u'_{0,k}(r)}{u_{0,k}(r)} - \frac{1}{r}. \quad (4.66)$$

Sustituyendo en la ecuación (4.65) se obtiene la siguiente expresión para la longitud de dispersión:

⁶En la práctica, con el método empleado para resolver el sistema de ecuaciones integrales, los cálculos numéricos se dificultan al emplear V_b con valores arbitrarios.

$$a = \lim_{\substack{k \rightarrow 0 \\ r_0 \rightarrow \infty}} \left[r_0 - \frac{u_{0,k}(r_0)}{u'_{0,k}(r_0)} \right]. \quad (4.67)$$

En la siguiente sección se emplea esta expresión para calcular la longitud de dispersión del pozo de potencial y potencial exponencial, para los potenciales de interacción dipolar y van der Waals (con barrera) se calculan numéricamente las funciones $u_{0,k}(r)$ y usando esta misma expresión se calcula numéricamente la longitud de dispersión.

Un método alternativo para calcular la longitud de dispersión a es el siguiente, primero se considera el desarrollo en potencias (pares) de k del corrimiento de fase δ_0 :

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_e k^2 + \dots \quad (4.68)$$

donde se define r_e como el *radio efectivo*. Es claro que está ecuación recupera la definición de la longitud de dispersión: $\lim_{k \rightarrow 0} \tan \delta_0/k = -a$. Sustituyendo esta expresión en la ecuación (4.35): $f \approx 1/(k \cot \delta_0 - ik)$ y despejando el inverso de la amplitud de dispersión se obtiene el siguiente desarrollo:

$$\frac{1}{f(k)} \approx -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_e k^2 - ik, \quad (4.69)$$

que comparando con (4.61) es posible determinar la longitud de dispersión.

Pozo de potencial.

Definiendo al pozo de potencial como:

$$U(r) = \begin{cases} -V_0 & r \leq R, \\ 0 & R \leq r, \end{cases} \quad (4.70)$$

en este caso la ecuación diferencial radial de Schrödinger, ecuación (4.11), con $l = 0$, se expresa como:

$$\frac{d^2}{dr^2} u_{0,k}(r) + \left(k^2 + \frac{2m_r V_0}{\hbar^2} \right) u_{0,k}(r) = 0 \quad r \leq R \quad (4.71)$$

que corresponde a la ecuación del oscilador armónico simple. La solución con la condición de que se anule en el origen $u_{0,k}(0) = 0$ es:

$$u_{0,k}(\alpha) = A \sin(\alpha r), \quad \text{donde: } \alpha = \sqrt{k^2 + \frac{2m_r}{\hbar^2} V_0}, \quad (4.72)$$

y A es una constante de normalización. Sustituyendo en la ecuación (4.67), con $r_0 = R$, se obtiene la expresión de la longitud de dispersión:

$$a = \lim_{k \rightarrow 0} \left[R - \frac{1 \operatorname{sen}(\alpha R)}{\alpha \cos(\alpha R)} \right] = R - \frac{\tan(\alpha_0 R)}{\alpha_0} \quad (4.73)$$

donde: $\alpha_0 \equiv \lim_{k \rightarrow 0} (\alpha) = \sqrt{2m_r V_0 / \hbar^2}$, definiendo $z = R \sqrt{2m_r V_0 / \hbar^2}$, se obtiene:

$$a(z) = R \left(1 - \frac{\tan z}{z} \right). \quad (4.74)$$

Potencial exponencial o de Rarita.

Si se define al potencial exponencial o de Rarita de la siguiente manera⁷:

$$U(r) = -V_0 e^{-r/R}. \quad (4.75)$$

en este caso la ecuación diferencial radial de Schrödinger, ecuación (4.11), con $l = 0$, se expresa como:

$$-\frac{d^2}{dr^2} u_{0,k}(r) - \left(k^2 + \frac{2m_r V_0}{\hbar^2} e^{-r/R} \right) u_{0,k}(r) = 0. \quad (4.76)$$

Haciendo el cambio de variable: $y = 2\alpha_0 R e^{-r/2R}$, donde $\alpha_0 = \sqrt{2m_r V_0 / \hbar^2}$, se obtiene:

$$y^2 \frac{d^2 u_{0,k}}{dy^2} + y \frac{d u_{0,k}}{dy} + [y^2 - \nu^2] u_{0,k} = 0 \quad (4.77)$$

que corresponde a la ecuación diferencial de Bessel de orden complejo: $\nu = i2Rk$, cuya solución general esta dada por la combinación lineal [Olver et al., 2010]:

$$u_{0,k}(y) = C_1 J_\nu(y) + C_2 N_\nu(y), \quad (4.78)$$

siendo C_1 y C_2 constantes, J_ν y N_ν corresponden a las funciones de Bessel y Neumann de orden ν . Para orden complejo las funciones de Bessel y Neumann, se puede verificar, son linealmente independientes. Notar que de acuerdo a la definición del cambio de variable, si $r = 0$ entonces $y = 2\alpha_0 R$, por lo tanto de la condición de frontera en el origen: $u_{0,k}(0) = 0$, se obtiene: $C_1 J_\nu(2R\alpha_0) + C_2 N_\nu(2R\alpha_0) = 0$, de esta manera la solución queda expresada como:

$$u_{0,k}(r) = C_1 [J_\nu(y) + \beta N_\nu(y)], \quad (4.79)$$

donde $\beta \equiv N_\nu(2R\alpha_0) / J_\nu(2R\alpha_0)$. Sustituyendo en la ecuación (4.67) se obtiene:

$$a = \lim_{\substack{k \rightarrow 0 \\ r_0 \rightarrow \infty}} \left[r_0 - \frac{J_\nu(y_0) + \beta N_\nu(y_0)}{J'_\nu(y_0) + \beta N'_\nu(y_0)} \right], \quad (4.80)$$

⁷Notar que hay un factor de diferencia respecto de la definición de Rarita [Rarita and Present, 1937] del potencial exponencial: $U(r) = -V_0 e^{-2br}$.

donde $y_0 = 2\alpha_0 R e^{-r_0/2R}$; el límite $k \rightarrow 0$ corresponde a $\nu \rightarrow 0$ mientras que el límite $r_0 \rightarrow \infty$ corresponde $y_0 \rightarrow 0$. Empleando las aproximaciones de las funciones de Bessel y de Neumann cerca de cero ($y \approx 0$) [Olver et al., 2010]:

$$\begin{aligned} J_0(z) &\approx 1, & J'_0(z) &\approx 0, \\ N_0(z) &\approx \frac{2}{\pi} \left[\ln\left(\frac{z}{2}\right) + \gamma \right], & N'_0(z) &\approx \frac{2}{\pi z}, \end{aligned} \quad (4.81)$$

donde $\gamma \approx 0,577$ es la constante de Euler-Mascheroni se obtiene el siguiente resultado:

$$a = \lim_{r_0 \rightarrow \infty} \left[r_0 - \frac{1 - \beta \left(\ln z - \frac{r}{2R} + \gamma \right)}{-\beta \frac{2}{\pi y} \frac{y}{2R}} \right] = \lim_{r_0 \rightarrow \infty} \left[r_0 - \frac{\pi R}{\beta} + 2R \left(\ln z - \frac{r_0}{2R} + \gamma \right) \right]. \quad (4.82)$$

Simplificando e identificando el factor: $z = R \sqrt{2m_r/V_0 \hbar^2}$, se obtiene el siguiente resultado, que esta de acuerdo al trabajo de Rarita [Rarita and Present, 1937]:

$$a(z) = -2R \left[\frac{\pi N_0(2z)}{2 J_0(2z)} - \ln(z) - \gamma \right]. \quad (4.83)$$

En la figura (4.3) se muestran las gráficas de la longitud de dispersión para el pozo de potencial y potencial exponencial como función de la variable z para los tres diferentes alcances: $R = 0.01, 0.05, 0.1, 0.5$. Se puede verificar que la longitud de dispersión para ambos potenciales toma valores positivos y negativos. Se puede observar que, en la variable $z = R \sqrt{2m_r/V_0 \hbar^2}$, los ceros y las divergencias de la longitud de dispersión ocurren para ciertos valores bien definidos de z y que son independientemente del alcance R . Los ceros y las divergencias para ambos potenciales se pueden calcular numéricamente de las ecuaciones⁸ (4.74) y (4.83) y en la figura (4.3) se especifican estos valores de z .

Para el caso del potencial de Yukawa y los potenciales dipolar y van der Waals (con barrera) se calcula la función $u_{0,k}(r)$ resolviendo numéricamente la ecuación diferencial (4.11) para cada potencial y la longitud de dispersión se determina por la ecuación⁹ (4.67). La figura (4.4) muestra las gráficas de la longitud de dispersión para estos potenciales. Algo de notar en estas gráficas es que para el potencial van der Waals los ceros de la longitud de dispersión si dependen del alcance R .

⁸En el caso del pozo de potencial potencial, las divergencia de la longitud de dispersión ocurren para los valores de $z = \pi/2, 3\pi/2, \dots$ que son los mismos valores para los cuales se producen un estado ligado, dos estados ligados, etc.

⁹El método es de simple implementación y no requiere, al menos para los potenciales analizados en este trabajo, algún método sofisticado para la solución de la ecuación diferencial. Este método se implemento en Mathematica con resultados satisfactorios.

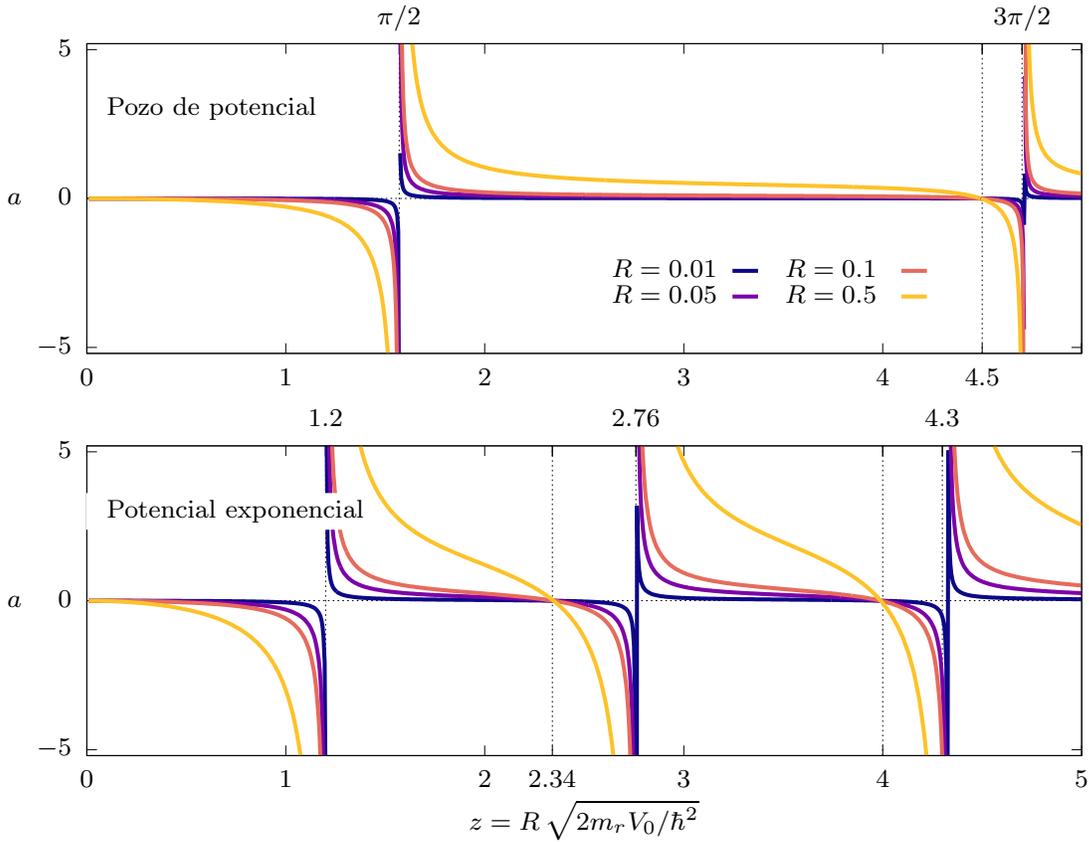


Figura 4.3: Gráficas de la longitud de dispersión $a(R, V_0)$ para el pozo de potencial y exponencial, ecuaciones (4.74) y (4.83). En el eje z se indican los ceros y divergencias de la longitud de dispersión para cada potencial, se observa que estos valores son los mismos para cualquier alcance R .

Es importante notar el factor de la masa reducida m_r en la ecuación (4.11) ya que por otra parte, en unidades de Fermi: $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m)$, se emplea la masa de una partícula. Para hacer una correspondencia entre la longitud de dispersión y los parámetros del potencial de interacción V_0 , R al estudiar las propiedades generales del gas la ecuación diferencial (4.11) en unidades de Fermi se escribe como:

$$\left[-2 \frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{\tilde{\chi}^2}{\tilde{R}^2} f\left(\tilde{r}/\tilde{R}\right) - \tilde{E} \right] u_{0,k}(r) = 0 \quad (4.84)$$

donde $\tilde{r} = r k_F$, $\tilde{V}_0 = V_0 / \epsilon_F$ y se define la variable: $\tilde{\chi} = \tilde{R} \sqrt{\tilde{V}_0}$, suponiendo partículas de igual masa: $m_r = m/2$.

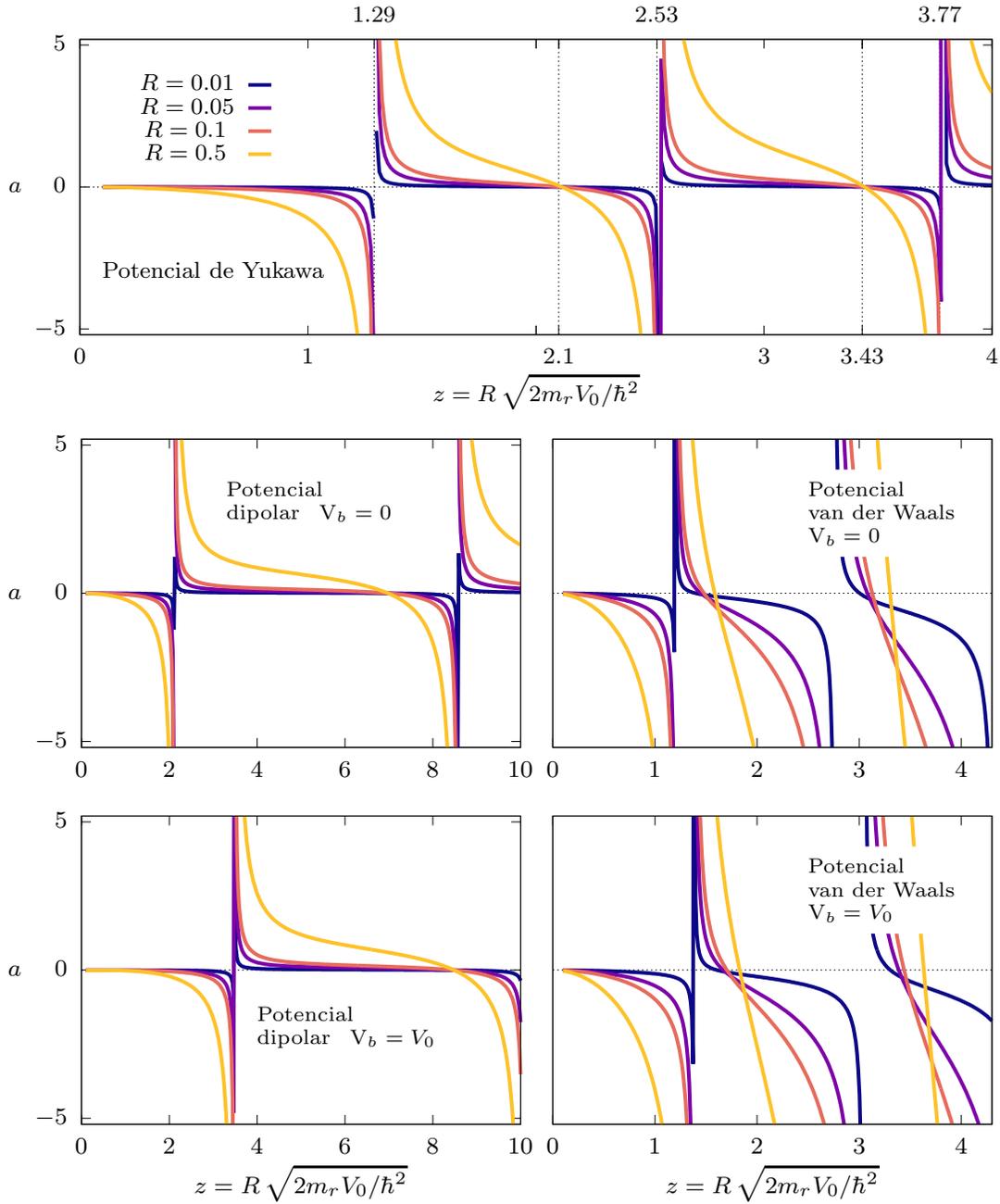


Figura 4.4: Longitud de dispersión calculada numéricamente para potencial de Yukawa, dipolar y van der Waals con barrera finita $V_b = 0, V_0$.

CAPÍTULO 5

Gas de Fermi con interacción.

UN gas ideal, sea clásico o cuántico, se define como un gas de partículas puntuales sin interacción que se mueven libremente dentro de un volumen de confinamiento. El gas ideal es un modelo simplificado que describe en ciertos límites el comportamiento real de los gases; sin embargo, algunas de las propiedades más interesantes de los gases, por ejemplo las transiciones de fase no son descritas por el modelo del gas ideal. En el mundo real las interacciones entre partículas son inevitables pues es difícil imaginar una partícula aisladas del todo. Sin embargo, en la parte teórica ha sido un reto analizar los sistemas de partículas con interacción y solo existen unos pocos sistemas cuya solución exacta puede ser obtenida, más aún, la inclusión de la temperatura en los sistemas de partículas conlleva una dificultad adicional. Es por ello que existen diversas técnicas para tratar estos sistemas.

En el fenómeno del crossover BCS-BEC, al tratarse de un gas de Fermi con interacción, se emplea la teoría BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer [[Bardeen et al., 1957](#)]) de superconductividad. Aunque la teoría original de Bardeen-Cooper-Schrieffer solo analizaba el estado base a temperatura cero empleando la función de onda BCS, poco después se desarrollaron varias teorías para incluir los efectos de temperatura. El método de Bogoliubov-Valatin es una extensión de la teoría BCS a partir de la cual es posible introducir la temperatura, la idea de este método consisten en hacer una transformación para diagonalizar el Hamiltoniano del sistema de fermiones y en este trabajo se utiliza este método.

En este capítulo se hace un análisis de la teoría BCS con el método de Bogoliubov-Valatin, el tratamiento se hace considerando un potencial de interacción $U(r)$ y a pesar de ser una aproximación de campo medio se incluyen los términos de interacción de *Hartree-Fock* que suelen ser ignorados. Para verificar los resultados obtenidos se compara con la aproximación de potencial de contacto, en el apéndice [A](#) se describe a detalle los desarrollos y aquí se presentan los principales resultados.

5.1. Gas ideal de Fermi en dos estados de espín.

Descripción del sistema.

Consideremos un gas de Fermi homogéneo (en ausencia de potencial externo) confinado en un volumen externo V , supondremos un gas diluido, es decir, solo hay colisiones entre pares de partículas. El gas esta compuesto de partículas con la misma masa m en dos estados diferentes de espín $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ en la misma proporción, es decir, si N es el número total de partículas del gas, entonces hay $N/2$ fermiones en cada estado de espín (los fermiones no pueden cambiar su estado de espín). En este caso el potencial químico para los fermiones en cada estado de espín toman el mismo valor: $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow}$, y por lo tanto, sin pérdida de generalidad, se considera únicamente el potencial químico μ de los N fermiones ($\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} = \mu/2$).

El Hamiltoniano de un gas ideal de Fermi contiene únicamente la energía cinética de la partículas y se escribe como:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{i=1}^{N/2} \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_{\uparrow i}^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_{\downarrow i}^2}{2m} \right), \quad (5.1)$$

que se puede expresar ya sea en la representación de coordenadas o de momentos. Sin embargo, cuando se analiza un sistema de muchos cuerpos lo más conveniente es representar el Hamiltoniano en segunda cuantización:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}, \uparrow} \epsilon_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{\mathbf{k}, \downarrow} \epsilon_{\mathbf{k}}), \quad (5.2)$$

donde: $\epsilon_{\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k}, \sigma | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \mathbf{k}, \sigma \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, son los estados de energía de partícula libre: y $\hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \equiv \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}$ corresponde al operador de número definido a partir de los operadores aniquilación y creación $\{\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger}\}$ en el espacio de Fock del estado $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$; donde \mathbf{k} representa el momento de la partícula y σ su estado de espín ($\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$). Para fermiones, los operadores de creación y aniquilación satisfacen las siguientes reglas anticonmutación:

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger} \right\} &\equiv \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger} + \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}, \\ \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'} \right\} &= \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger} \right\} = 0. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Por conveniencia se escoge la representación del ensamble gran canónico en la cual el gran potencial queda determinado por la siguiente expresión¹:

$$\hat{\Omega}_0 = \hat{\mathcal{H}}_0 - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}, \uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}, \downarrow}) (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu), \quad (5.4)$$

¹En el gran canónico: $\Omega(T, V, \mu) = E(S, V, N) - TS - \mu N$

donde μ es el potencial químico cuyo valor queda determinado por el número de partículas del gas N y cuyo operador esta dado por:

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k},\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k},\downarrow}), \quad (5.5)$$

De acuerdo a la teoría de la física estadística, en general se tiene la siguiente relación:

$$\Omega(T, V, \mu) = -k_B T \ln \Xi, \quad (5.6)$$

donde:

$$\Xi = \text{Tr} \exp \left[-\beta (\hat{\mathcal{H}}_0 - \mu \hat{N}) \right] \quad (5.7)$$

es la función de gran partición y $\beta = 1/k_B T$, siendo k_B la constante de Boltzmann.

A continuación se obtiene la expresión del gran potencial $\Omega_0(T, V, \mu)$ del gas ideal de Fermi, para ello se denotan los estados de ocupación en el espacio de Fock de la siguiente manera: $|\bar{\mathbf{n}}_\sigma\rangle = |n_{1,\sigma} n_{2,\sigma} \dots n_{\infty,\sigma}\rangle$, donde $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$, de tal manera que la función de gran partición queda determinada como:

$$\Xi = \sum_{\bar{\mathbf{n}}_\uparrow} \sum_{\bar{\mathbf{n}}_\downarrow} \langle \bar{\mathbf{n}}_\uparrow | \langle \bar{\mathbf{n}}_\downarrow | e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 - \mu \hat{N})} | \bar{\mathbf{n}}_\uparrow \rangle | \bar{\mathbf{n}}_\downarrow \rangle = \sum_{\bar{\mathbf{n}}_\uparrow} \sum_{\bar{\mathbf{n}}_\downarrow} \langle \bar{\mathbf{n}}_\uparrow | \langle \bar{\mathbf{n}}_\downarrow | e^{-\beta \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}\uparrow} + n_{\mathbf{k}\downarrow})(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} | \bar{\mathbf{n}}_\uparrow \rangle | \bar{\mathbf{n}}_\downarrow \rangle, \quad (5.8)$$

empleando la propiedad de que los estados de ocupación son productos del tipo: $|n_{1,\sigma} n_{2,\sigma} \dots n_{\infty,\sigma}\rangle = |n_{1,\sigma}\rangle |n_{2,\sigma}\rangle \dots |n_{\infty,\sigma}\rangle$, entonces:

$$\Xi = \left[\sum_{n_{1,\uparrow}} e^{-\beta n_{1,\uparrow}(\epsilon_1 - \mu)} \right] \dots \left[\sum_{n_{\infty,\uparrow}} e^{-\beta n_{\infty,\uparrow}(\epsilon_{\infty} - \mu)} \right] \cdot \left[\sum_{n_{1,\downarrow}} e^{-\beta n_{1,\downarrow}(\epsilon_1 - \mu)} \right] \dots \left[\sum_{n_{\infty,\downarrow}} e^{-\beta n_{\infty,\downarrow}(\epsilon_{\infty} - \mu)} \right], \quad (5.9)$$

para fermiones $n_{\mathbf{k},\sigma}$ puede ser únicamente 0 o 1, entonces: $\sum_{n_{i,\sigma}} e^{-\beta n_{i,\sigma}(\epsilon_i - \mu)} = 1 + e^{-\beta(\epsilon_i - \mu)}$ y por lo tanto la función de gran partición queda expresada como:

$$\Xi = \prod_{\mathbf{k}=0}^{\infty} [1 + e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}]^2, \quad (5.10)$$

el exponente al cuadrado en cada uno de los términos del producto se debe a que hay dos factores iguales debido a los dos posibles estados de espín. Así, finalmente se tiene la expresión del gran potencial del gas ideal de Fermi:

$$\Omega_0(T, V, \mu) = -2k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_{\mathbf{k}})}]. \quad (5.11)$$

En el límite termodinámico, el gran potencial, se expresa como:

$$\Omega_0(T, V, \mu) = -2k_B T \int_0^{\infty} \rho(\epsilon) \ln \{1 + e^{\beta[\mu - \epsilon_{\mathbf{k}}]}\} d\epsilon, \quad (5.12)$$

donde $\rho(\epsilon)$ corresponde a la densidad de estados de los fermiones. Todas las propiedades termodinámicas del gas ideal de Fermi se pueden obtener del potencial termodinámico $\Omega(T, V, \mu)$, en el caso de un gas homogéneo (potencial externo cero) en tres dimensiones la densidad de estados varía de la siguiente manera: $\rho(\epsilon) \sim \epsilon^{1/2}$ y el gran potencial queda expresado como [Pathria, 1996]:

$$\Omega_0(T, V, \mu) = -k_B T \frac{V}{\lambda_T^3} f_{5/2}(\alpha) \quad (5.13)$$

donde: $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ es la longitud de onda térmica, $f_{5/2}(\alpha)$ es la función de Fermi 5/2, que en general se definen como:

$$f_n(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1} dx}{e^{x-\alpha} - 1} = \alpha - \frac{\alpha^2}{2^n} + \frac{\alpha^3}{3^n} - \dots \quad (5.14)$$

y $\alpha = \mu/k_B T$. La presión del gas ideal de Fermi se obtiene de la relación: $pV = -\Omega$, mientras que la energía interna se puede calcular de la relación: $E = -\partial \ln \Xi / \partial \beta$, obteniendo las siguientes expresiones:

$$E = \frac{3}{2} \frac{k_B T V}{\lambda_T^3} f_{5/2}(\alpha) = \frac{3}{2} N k_B T \frac{f_{5/2}(\alpha)}{f_{3/2}(\alpha)}, \quad p = \frac{k_B T}{\lambda_T^3} f_{5/2}(\alpha), \quad (5.15)$$

de estas expresiones se obtiene la siguiente importante relación:

$$pV = \frac{2}{3} E. \quad (5.16)$$

La distribución o número de ocupación de partículas en cada estado (\mathbf{k}, σ) satisfacen la estadística de Fermi-Dirac:

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle = \frac{1}{1 + e^{\beta(\mu - \epsilon_{\mathbf{k}})}}. \quad (5.17)$$

Es importante recalcar que para el gas ideal de Fermi el Hamiltoniano (5.2) es diagonal en la representación de los operadores de número $n_{\mathbf{k}, \sigma}$ con una relación de dispersión $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ y por lo tanto es posible de calcular tanto la función de partición, ecuación (5.10), como el gran potencial, ecuación (5.12), a partir de la cual se obtienen todas las propiedades termodinámicas del sistema.

Gas degenerado de Fermi.

En el estado base del gas de Fermi, $T = 0$, el potencial químico corresponde a la energía de Fermi: $\mu_0 = \epsilon_F$, donde se define la energía y momento de Fermi como:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, \quad k_F = (3\pi^2 \rho)^{1/3}. \quad (5.18)$$

donde $\rho = N/V$ es la densidad de partículas. El numero de ocupación esta dado por:

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \begin{cases} 1 & \text{si } \epsilon_{\mathbf{k}} \leq \epsilon_F \\ 0 & \text{si } \epsilon_{\mathbf{k}} > \epsilon_F \end{cases}. \quad (5.19)$$

En el límite $T \rightarrow 0$, que corresponde a $\alpha \rightarrow \infty$, se pueden emplear los límites asintóticos de las funciones de Fermi y se pueden demostrar las siguientes aproximaciones para la energía y la presión [Pathria, 1996]:

$$\begin{aligned} E &\approx \frac{3}{5} \epsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right) + \dots \right] \\ p &\approx \frac{2}{5} \rho \epsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right) + \dots \right] \end{aligned} \quad (5.20)$$

de tal manera que la energía y la presión en el gas degenerado de Fermi están dadas por:

$$E(T=0) = \frac{3}{5} \epsilon_F, \quad p(T=0) = \frac{2}{5} \rho \epsilon_F, \quad (5.21)$$

5.2. Hamiltoniano de un gas de Fermi con interacción.

Consideremos ahora las interacciones entre partículas en un gas de Fermi, como es sabido, no es posible determinar de manera general una base en la cual el sistema de fermiones con interacción sea diagonal y existen diferentes teorías y aproximaciones para abordar este problema. En el presente trabajo se emplea la teoría de transformación de Bogolyubov-Valantin. Esta teoría consiste en utilizar una transformación de los operadores de Fermi a una base en la cual el sea posible diagonalizar el Hamiltoniano (esta diagonalización conduce a la ecuación de gap, conocida de la teoría BCS de superconductividad). Una de las ventajas de esta teoría consiste en poder representar al Hamiltoniano en términos del concepto de cuasipartícula con una relación de dispersión diferente al del gas ideal pero conocida y que permite incluir la temperatura. En el caso de temperatura cero, la teoría de Bogolyubov-Valantin recupera los resultados conocidos de la teoría BCS que emplea un método variacional para determinar la función del estado del gas de Fermi.

Consideremos entonces un gas de fermiones, dos estados diferentes de espín $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ en la misma proporción, que interactúan a través de un potencial de interacción $U(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ que es independiente del espín. El Hamiltoniano del gas se escribe como:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^{N/2} \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_{\uparrow i}^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_{\downarrow i}^2}{2m} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N U(\vec{r}_i - \vec{r}_j), \quad (5.22)$$

que en el formalismo de segunda cuantización se expresa como:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{int} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow}) + \hat{\mathcal{H}}_{int}, \quad (5.23)$$

respecto del Hamiltoniano del gas ideal de Fermi, ecuación (5.2), en este caso se añade el término de interacción entre partículas $\hat{\mathcal{H}}_{int}$, cuya expresión general esta dada por la siguiente expresión:

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4; \sigma, \sigma'} U_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_1, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2, \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_3, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}_4, \sigma}, \quad (5.24)$$

donde, $U_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}$ es la transformada de Fourier del potencial de interacción²:

$$U_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} = \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \frac{1}{V} \int e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}} U(r) d^3 \mathbf{r}. \quad (5.25)$$

El término de interacción (5.24) se puede entender como la colisión entre dos partículas cuyos estados iniciales son: $|\mathbf{k}_4, \sigma\rangle$ y $|\mathbf{k}_3, \sigma'\rangle$ y después de la colisión tienen estados: $|\mathbf{k}_2, \sigma'\rangle$ y $|\mathbf{k}_1, \sigma\rangle$.

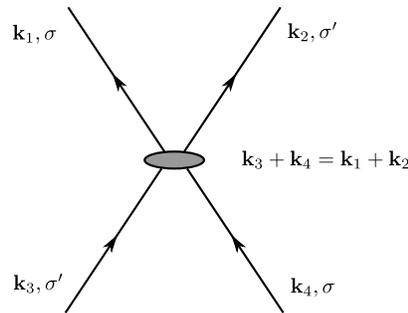


Figura 5.1: Término de interacción entre dos partículas: colisión entre dos partículas cuyos estados iniciales son: $|\mathbf{k}_4, \sigma\rangle$ y $|\mathbf{k}_3, \sigma'\rangle$ y después de la colisión tienen estados: $|\mathbf{k}_2, \sigma'\rangle$ y $|\mathbf{k}_1, \sigma\rangle$.

En general, el término de interacción, que consiste en una suma en tres índices, es difícil de tratar; sin embargo es posible reducir la suma a solo dos índices suponiendo que la colisión ocurre

²La delta de Dirac representa la conservación de momento, además como el potencial de interacción no depende del espín de las partículas el espín también se conserva.

solamente entre pares de fermiones en estados opuestos, esta aproximación queda justificada al considerar que las colisiones entre fermiones en el mismo estado son despreciables ya que obedecen el principio de Pauli. En adelante se emplea siguiente notación para representar a los: $\mathbf{k} \equiv |\mathbf{k}, \uparrow\rangle$, $-\mathbf{k} \equiv |-\mathbf{k}, \downarrow\rangle$.

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

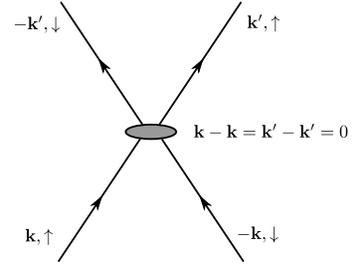


Figura 5.2: Interacción entre pares de fermiones en estados opuestos.

Con esta aproximación el término de interacción (5.24) se reduce a la suma de tres de términos³:

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = \hat{\mathcal{H}}_H + \hat{\mathcal{H}}_F + \hat{\mathcal{H}}_p \quad (5.26)$$

cada uno de ellos expresados de la siguiente manera [Leggett, 2006]:

Término de Hartree:	$\hat{\mathcal{H}}_H = \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (n_{\mathbf{k}\uparrow} + n_{\mathbf{k}\downarrow}) (n_{\mathbf{k}'\uparrow} + n_{\mathbf{k}'\downarrow})$	
Término de Fock:	$\hat{\mathcal{H}}_F = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (n_{\mathbf{k}\uparrow}n_{\mathbf{k}'\uparrow} + n_{\mathbf{k}\downarrow}n_{\mathbf{k}'\downarrow})$,	(5.27)
Término de pares:	$\hat{\mathcal{H}}_p = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}$	

donde $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ es a la transformada de Fourier del potencial de interacción $U(r)$ representada en los estados \mathbf{k} y \mathbf{k}' :

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \equiv \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} U(r) d^3r. \quad (5.28)$$

La transformada de Fourier del potencial evaluada en cero: $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = 0$, se denotará de la siguiente manera: $U_0 \equiv U(0)$. Así, el Hamiltoniano del gas de fermiones queda expresado de la siguiente manera:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{int} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow}) + \hat{\mathcal{H}}_H + \hat{\mathcal{H}}_F + \hat{\mathcal{H}}_p. \quad (5.29)$$

³Los detalles se pueden ver en el apéndice A.

en el ensamble gran canónico⁴:

$$\hat{\Omega} = \hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow}) + \hat{\mathcal{H}}_H + \hat{\mathcal{H}}_F + \hat{\mathcal{H}}_p. \quad (5.30)$$

donde el potencial químico μ , de la misma manera que para el gas de Fermi ideal, queda determinado por el número de partículas:

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma}. \quad (5.31)$$

El *término de pares* $\hat{\mathcal{H}}_p$ es característico de un sistema de fermiones con interacción en el marco de la teoría BCS y da origen a la ecuación del gap [Philip L Taylor, 2002]; se puede mostrar que este término es negativo y conduce a que el estado más estable del sistema de fermiones es aquel donde los fermiones forman pares de Cooper, cuyas propiedades se discute en la sección 7.2. Por otra parte, los *términos de Hartree y de Fock*: H_h , H_f , son resultado de la *aproximación de campo medio* [Nolting and Brewer, 2009, pp201], el signo de ambos términos depende del signo de U_0 , aunque ambos tienen signos contrarios (notar el signo menos en el término de Fock). Para un potencial de interacción atractivo: el término de Hartree es negativo y el de Fock es positivo. La energía de Hartree-Fock, como se muestra en el capítulo (6), son pequeñas en comparación con la energía cinética y de pares.

5.3. Transformación de Bogoliubov-Valatin.

La transformación de Bogoliubov-Valatin ha sido empleada como una extensión de la teoría BCS para incluir los efectos de temperatura y consiste en un método que permite diagonalizar el Hamiltoniano con interacción (5.30) y reducirlo a un Hamiltoniano de *cuasipartícula libre*, es decir, el Hamiltoniano resultante contiene únicamente operadores de número en la nueva representación [Bogolyubov, 1947],[Alexander L. Fetter, 1971] y por lo tanto la distribución de partículas viene dada por una expresión semejante a la ecuación (5.17), pero con una relación de dispersión diferente a la de partícula libre que se determina al diagonalizar el Hamiltoniano.

Se define la transformación de Bogoliubov-Valatin mediante los siguientes operadores:

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}}\hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}, \\ \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}\hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow} + v_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}; \end{aligned} \quad (5.32)$$

donde $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ son parámetros que se ajustan para diagonalizar el Hamiltoniano (5.30). Estos operadores ($\hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}$, $\hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}^{\dagger}$) satisfacen las reglas usuales de anticonmutación de fermiones:

⁴Es importante notar el Hamiltoniano con interacción $\hat{\mathcal{H}}$ no corresponde a la energía interna “usual” del gas, sino a la transformación: $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = E - \eta C$, donde $E = E(S, V, N)$ es la energía interna, η es el inverso de la longitud de dispersión y C es la variable de contacto, ambas: η y C , son las variables conjugadas asociadas a la interacción de las partículas en el gas, ver más adelante la sección 6.1.

$$\begin{aligned} \{\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^\dagger\} &= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \\ \{\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}\} &= \{\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = 0; \end{aligned} \quad (5.33)$$

se definen los operadores de número en la nueva representación como:

$$\begin{aligned} \hat{m}_{\mathbf{k}} &= \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \\ \hat{m}_{-\mathbf{k}} &= \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (5.34)$$

para garantizar que la transformación sea unitaria, los parámetros $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ deben satisfacer la siguiente relación:

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (5.35)$$

En el apéndice A se hace a detalle el procedimiento de aplicar la transformación de Bogoliubov-Valatin para cada uno de los términos del Hamiltoniano suponiendo un potencial de interacción $U(r)$, así como el procedimiento para diagonalizar el Hamiltoniano, aquí se presentan los resultados generales.

Los parámetros $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ están determinados por las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} (1 + x_{\mathbf{k}}) \\ v_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} (1 - x_{\mathbf{k}}) \end{aligned}, \quad \text{donde: } x_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}, \quad \begin{aligned} \mathcal{E}_{\mathbf{k}} &\equiv \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \epsilon_H + \epsilon_F \\ E_{\mathbf{k}} &\equiv \sqrt{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} \end{aligned} \quad (5.36)$$

se definen: el *gap* $\Delta_{\mathbf{k}}$, la *energía de Hartree* ϵ_H y la *energía de Fock* ϵ_F por medio del siguiente sistema de ecuaciones implícitas:

$$\begin{aligned} \epsilon_H &= \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}'} [(1 - x_{\mathbf{k}}) + x_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}})], \\ \epsilon_F &= -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} [(1 - x_{\mathbf{k}}) + x_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}})], \\ \Delta_{\mathbf{k}} &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}), \end{aligned} \quad (5.37)$$

Las dos primeras ecuaciones son resultado de considerar los términos de Hartree y de Fock en el Hamiltoniano y la última es la conocida *ecuación del gap* resultado de la teoría BCS. Este sistema de ecuaciones (integrales), junto con la ecuación del número de partícula:

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \left[1 - x_{\mathbf{k}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}) \right]. \quad (5.38)$$

determinan los valores de: ϵ_H , ϵ_F , $\Delta_{\mathbf{k}}$ y el potencial químico μ teniendo como parámetro la transformada de Fourier $U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ y por lo tanto las propiedades de interacción; en el modelo del crossover con un *potencial de contacto*, ver siguiente sección, se considera el límite de bajas energías y es posible relación la transformada de Fourier con la longitud de dispersión del problema de dos cuerpos. Las siguientes relaciones son de utilidad:

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{2}\sqrt{1-x_{\mathbf{k}}^2} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} \\ u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 &= x_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (5.39)$$

El gran potencial del gas de Fermi, ecuación (5.30), en la nueva representación se expresa de la siguiente manera:

$$\hat{\Omega} = \hat{\mathcal{H}}_0 - \mu\hat{N} + \hat{\mathcal{H}}_H + \hat{\mathcal{H}}_F + \hat{\mathcal{H}}_p, \quad (5.40)$$

donde:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_0 - \mu\hat{N} &= \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) [(1 - x_{\mathbf{k}}) + x_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}})], \\ \hat{\mathcal{H}}_H &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_H [(1 - x_{\mathbf{k}}) + x_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}})], \\ \hat{\mathcal{H}}_F &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_F [(1 - x_{\mathbf{k}}) + x_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}})], \\ \hat{\mathcal{H}}_p &= - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E_{\mathbf{k}}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (5.41)$$

mientras que la ecuación del numero de partículas (5.31) se expresa como:

Sumando todos los términos del gran potencial, es posible expresarlo de la siguiente manera:

$$\hat{\Omega} = \hat{\mathcal{H}} - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} \left[\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F)}{2} \right]. \quad (5.42)$$

donde:

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F) \mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}, \quad (5.43)$$

es la relación de dispersión de las cuasipartículas. La ventaja de esta expresión es que contiene únicamente operadores de número, entonces los estados de ocupación en el espacio de Fock de

cuasipartícula quedan definidos como⁵: $|\bar{\mathbf{m}}\rangle = |m_1 m_2 \dots m_\infty\rangle = |m_1\rangle |m_2\rangle \dots |m_\infty\rangle$ y por lo tanto la función de gran partición del gas de fermiones con interacción se expresa como:

$$\Xi = \text{Tr} \exp \left[-\beta \left(\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N} \right) \right] = \sum_{\bar{\mathbf{m}}} \langle \bar{\mathbf{m}} | e^{-\beta \left(\sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} \left[\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F)}{2} \right] \right)} | \bar{\mathbf{m}} \rangle, \quad (5.44)$$

Los operadores de número $m_{\pm\mathbf{k}}$ son diagonales en la base de estados $|\bar{\mathbf{m}}\rangle$; además, puesto que los operadores $\hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}$ satisfacen reglas de anticonmutación, tienen propiedades de fermión y satisfacen el principio de Pauli entonces $\langle m_{\pm\mathbf{k}} \rangle$ solo toma los valores 0 y 1. Con estas consideraciones es posible calcular de forma explícita la función de gran partición:

$$\Xi = \prod_{\mathbf{k}=0}^{\infty} [1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}}]^2 \cdot e^{-\beta \sum_{\mathbf{k}} \left(\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F)}{2} \right)}, \quad (5.45)$$

notar que el término $\sum_{\mathbf{k}} \left[\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F)}{2} \right]$ no contiene operadores de número. Finalmente el gran potencial queda expresado de la siguiente manera:

$$\Omega(T, V, \mu) = -2k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln \{1 + e^{-\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}}\} + \sum_{\mathbf{k}} \left[\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F)}{2} \right], \quad (5.46)$$

Es importante notar que el potencial químico de las cuasipartículas es cero, el primer término representa el gran potencial de un gas de cuasipartículas con estados de energía: $\mathcal{E}_{\mathbf{k}}$, el segundo término, que no depende de la temperatura, corresponde al gran potencial del estado base ($T = 0$):

$$\Omega(T = 0, V, \mu) = \sum_{\mathbf{k}} \left[\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F)}{2} \right], \quad (5.47)$$

mientras que el sistema de ecuaciones (5.37) en el estado base se reduce a las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_0 - \mu \hat{N} &= \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) (1 - x_{\mathbf{k}}), \\ \hat{\mathcal{H}}_H &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_H (1 - x_{\mathbf{k}}), \\ \hat{\mathcal{H}}_F &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_F (1 - x_{\mathbf{k}}), \\ \hat{\mathcal{H}}_p &= - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E_{\mathbf{k}}}. \end{aligned} \quad (5.48)$$

⁵En analogía a los estados de ocupación en el espacio de Fock de partícula libre.

finalmente la ecuación del número de partículas se expresa como:

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} (1 - x_{\mathbf{k}}). \quad (5.49)$$

5.4. Modelo con potencial de contacto.

En un gas a bajas temperaturas es valido considerar el límite de bajas energías ($k \rightarrow 0$) donde la transformada de Fourier del potencial es constante: $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \approx U_0$, en este caso es posible considerar las interacciones entre partículas en la aproximación de *potencial de contacto*: $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$, donde a es la longitud de dispersión, aunque en esta aproximación, como se muestra en breve, la ecuación del gap diverge y es necesario tomar el cuenta una aproximación más adecuada del problema de dos cuerpos, en la sección (4.5) se discute este problema, con lo cual se obtiene la siguiente relación:

$$\frac{1}{U_0} = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\vec{\mathbf{k}}} \frac{1}{2\epsilon_{\vec{\mathbf{k}}}}, \quad (5.50)$$

donde el factor 2 en los estados de energía $\epsilon_{\mathbf{k}}$ se debe a que en el problema de dos cuerpos se emplea la masa reducida: $m_r = m/2$, ver ecuación (4.47).

En la aproximación de potencial de contacto los términos de Hartree y de Fock conducen a divergencias y por lo tanto, en esta aproximación, ambos términos se omiten. Para ver esto hay que sustituir la aproximación de bajas energías: $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \approx U_0$ en las expresiones de la ecuación (5.37); en este caso se puede notar que la energía de Hartree y de Fock son similares (difieren únicamente por el signo y un factor 1/2) por lo tanto se pueden sumar, el factor U_0 sale de la suma y se obtienen las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \epsilon_H + \epsilon_F = \epsilon_{HF} &= \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}'} [(1 - x_{\mathbf{k}}) + x_{\mathbf{k}} (\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle + \langle \hat{n}_{-\mathbf{k}} \rangle)] = \frac{U_0}{2V} N, \\ \Delta_{\mathbf{k}} &= -\frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} (1 - \langle \hat{n}_{\mathbf{k}'} \rangle - \langle \hat{n}_{-\mathbf{k}'} \rangle). \end{aligned} \quad (5.51)$$

En la ecuación del gap hay dos puntos a resaltar y que son consecuencia de la aproximación $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \approx U_0$:

1. El gap es independiente de \mathbf{k} , es decir constante: $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$; esto se debe a que si U_0 es constante entonces el lado derecho de la ecuación del gap es una suma sobre todos los valores posibles de \mathbf{k}' , en el límite termodinámico una integral sobre todos los valores de \mathbf{k}' y por lo tanto independiente de \mathbf{k}' . En este caso, la ecuación del gap queda expresada como:

$$1 = -\frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}'}} (1 - \langle \hat{m}_{\mathbf{k}'} \rangle - \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}'} \rangle), \quad (5.52)$$

2. La ecuación del gap diverge, esto se puede ver del primer factor de la ecuación anterior, que en el límite termodinámico, el lado derecho corresponde a una integral que no converge:

$$\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \xrightarrow{\text{límite termodinámico}} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} \frac{k^2 dk d\Omega_{\mathbf{k}}}{2\sqrt{(k^2 - \mu)^2 + \Delta^2}} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \int_{k_0}^{\infty} k dk, \quad (5.53)$$

es por ello que al emplear la aproximación de Born del potencial de contacto: $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$.

En la aproximación de Born del potencial de contacto: $U_0 = 4\pi\hbar^2 a/m$, se puede corroborar que el término de la energía de pares $\hat{\mathcal{H}}_p$, ecuación (5.41), también diverge. Sin embargo, resulta interesante notar que la energía de Hartree-Fock no diverge: $\epsilon_{HF} = U_0 N/2V = 4\pi\hbar^2 a N/mV$.

Para anular la divergencia en la ecuación del gap es necesario aproximar a segundo orden la amplitud de dispersión en el problema de dos cuerpo, cuyo resultado da la ecuación (5.50) que también diverge pero justo anula la divergencia de la ecuación del gap. Con este procedimiento de *renormalización*, la ecuación del gap se expresa como:

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\vec{k}}} = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}'}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}), \quad (5.54)$$

se puede verificar que esta ecuación no diverge. Ahora bien, para ser consistente es necesario sustituir la ecuación de renormalización (5.50) en la energía de Hartree-Fock, ecuación (5.51):

$$\epsilon_{HF} \left(\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\vec{k}}} \right) = \frac{N}{2V}, \quad (5.55)$$

en este caso la energía de Hartree-Fock se anula debido al término divergente: $\sum_{\mathbf{k}} 1/2\epsilon_{\mathbf{k}}$. Por lo tanto en la aproximación de contacto la energía de Hartree-Fock es cero y entonces la expresión (5.43) toma la forma: $\mathcal{E}_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} - \Delta^2/2E_{\mathbf{k}}$, donde:

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}. \quad (5.56)$$

Para recuperar el gran potencial en la aproximación de potencial de contacto es necesario regresar a la expresión (5.42) que en este caso se escribe como:

$$\hat{\Omega} = \sum_{\mathbf{k}} \left(E_{\mathbf{k}} - \frac{\Delta^2}{2E_{\mathbf{k}}} \right) (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} \left[(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \left(E_{\mathbf{k}} - \frac{\Delta^2}{2E_{\mathbf{k}}} \right) \right]. \quad (5.57)$$

reordenando convenientemente los términos, se puede expresar de la siguiente manera:

$$\hat{\Omega} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) - \Delta^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}} - 1), \quad (5.58)$$

donde en el último término se emplear la ecuación del gap (5.54), por lo tanto:

$$\hat{\Omega} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - E_{\mathbf{k}}) + \Delta^2 \left(\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\vec{k}}} \right). \quad (5.59)$$

Esta es la expresión del gran potencial para el gas de Fermi con interacción en la aproximación de potencial de contacto y que coincide con la reportada en diferentes trabajos [Parish, 2015], [Hu et al., 2007]. Se puede comprobar que la función de gran partición en este caso es:

$$\Xi = \prod_{\mathbf{k}=0}^{\infty} [1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}}]^2 \cdot e^{-\beta \left\{ \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - E_{\mathbf{k}}) + \Delta^2 \left(\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\vec{k}}} \right) \right\}}, \quad (5.60)$$

y por lo tanto el gran potencial esta dado por:

$$\Omega(T, V, \mu) = -2k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln \{1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}}}\} + \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - E_{\mathbf{k}}) + \Delta^2 \left(\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\vec{k}}} \right). \quad (5.61)$$

Es interesante notar que en este caso la ecuación del gap (5.54) se puede obtener del gran potencial de la siguiente manera:

$$\left(\frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial \Delta} \right)_{T, V, \mu} = 0 \quad \text{ecuación del gap.} \quad (5.62)$$

El estado base ($T = 0$) la ecuación del gap y el gran potencial se reducen a la siguientes expresiones:

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}'}} + \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\vec{k}}}, \quad (5.63)$$

$$\hat{\Omega} = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - E_{\mathbf{k}}) + V \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\vec{k}}} - \frac{mV}{4\pi\hbar^2 a} \Delta^2, \quad (5.64)$$

la ecuación del número de partículas es la misma que (5.49).

5.5. Expresiones en el límite termodinámico.

A continuación se escriben las expresiones obtenidas en este capítulo en el límite termodinámico. Las diferentes variables se expresan en unidades de Fermi y se denotadas con una tilde sobre cada variable. Las unidades de Fermi se basan en la energía de Fermi del gas: $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$, donde $k_F = (3\pi^2 \rho)^{1/3}$ y en el apéndice (B) se muestra a detalle como se implementa el límite termodinámico así como las unidades de Fermi. Estas expresiones son las que se implementan numéricamente y en el siguiente capítulo se presentan los resultados.

Ecuación de número de partículas:

$$N = \frac{3}{4} \int_0^\infty \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{\tilde{\beta} \tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right] \sqrt{x'} dx'. \quad (5.65)$$

donde x es la variable adimensional: $x = k^2 / k_F^2$.

Sistema de ecuaciones integrales:

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_H &= \frac{\tilde{U}_0}{3\pi^2} \\ \tilde{\epsilon}_F &= -\frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \frac{1}{2} \tilde{F} \left(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R} \right) \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{\tilde{\beta} \tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}}{2} \right) \right] \sqrt{x'} dx' \\ \tilde{\Delta}_x &= -\frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \tilde{F} \left(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R} \right) \frac{\tilde{\Delta}_{x'}}{2\tilde{E}_{x'}} \tanh \left(\frac{\tilde{\beta} \tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}}{2} \right) \sqrt{x'} dx', \end{aligned} \quad (5.66)$$

donde $\tilde{U}_0 = U_0 k_F^3 / \epsilon_F$ y la función $\tilde{F} \left(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R} \right)$ corresponde a la integral de la transformada de Fourier del potencial, $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ en el ángulo sólido:

$$F(k, k', V_0, R) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d\Omega_{\mathbf{k}}. \quad (5.67)$$

Términos de la energía:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{H}}_K &= \frac{3}{4}N \int_0^\infty (\tilde{x} - \tilde{\mu}) \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_x}{\tilde{E}_x} \tanh\left(\frac{\beta \mathcal{E}_x}{2}\right) \right] \sqrt{x} dx, \\
\tilde{\mathcal{H}}_H &= \frac{\tilde{\epsilon}_H}{2}N, \\
\tilde{\mathcal{H}}_F &= \frac{3}{8}N \int_0^\infty \tilde{\epsilon}_F(x) \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_x}{\tilde{E}_x} \tanh\left(\frac{\beta \mathcal{E}_x}{2}\right) \right] \sqrt{x} dx, \\
\tilde{\mathcal{H}}_p &= -\frac{3}{4}N \int_0^\infty \frac{\tilde{\Delta}_x^2}{2\tilde{E}_x} \tanh\left(\frac{\beta \mathcal{E}_x}{2}\right) \sqrt{x} dx.
\end{aligned} \tag{5.68}$$

Gran potencial:

$$\tilde{\Omega}(T, V, \mu) = -\frac{3}{2}N\tilde{T} \int_0^\infty \ln\{1 + e^{-\beta \mathcal{E}_k}\} \sqrt{x} dx + \frac{3}{4}N \int_0^\infty \left[\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_k - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F)}{2} \right] \sqrt{x} dx. \tag{5.69}$$

Aproximación de potencial de contacto.

Ecuación del gap:

$$\frac{1}{\tilde{a}} = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left(\frac{1}{x} - \frac{x - \tilde{\mu}}{\tilde{E}_x} \tanh\left(\frac{\beta \tilde{E}_x}{2}\right) \right) \sqrt{x} dx. \tag{5.70}$$

Términos de la energía:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{H}}_K &= \frac{3}{4}N \int_0^\infty (\tilde{x} - \tilde{\mu}) \left[1 - \frac{x - \tilde{\mu}}{\tilde{E}_x} \tanh\left(\frac{\beta \tilde{E}_x}{2}\right) \right] \sqrt{x} dx, \\
\tilde{\mathcal{H}}_p &= -\frac{3}{4}N\tilde{\Delta} \int_0^\infty \frac{\tanh(\beta \mathcal{E}_x/2)}{2\tilde{E}_x} \sqrt{x} dx.
\end{aligned} \tag{5.71}$$

Gran potencial:

$$\tilde{\Omega}(T, V, \mu) = -2\tilde{T} \sum_{\mathbf{k}} \ln\{1 + e^{-\beta \mathcal{E}_k}\} + \frac{3}{4}N \int_0^\infty \left[\left(x - \tilde{\mu} - \tilde{E} + \frac{\tilde{\Delta}^2}{2x} \right) \right] \sqrt{x} dx - \frac{3\pi N}{8} \frac{\tilde{\Delta}^2}{\tilde{a}}, \tag{5.72}$$

es importante decir que el término de pares $\tilde{\mathcal{H}}_p$ diverge pero el gran potencial Ω no lo hace debido a que ya tiene incluido el término de renormalización.

El estado base, a temperatura cero: $\tanh(\beta \mathcal{E}_x/2) = 1$.

Parte III
Resultados

Crossover potencial finito, termodinámica.

En el modelo de Leggett del crossover [Leggett, 1980] así como en trabajos posteriores consideran la interacción entre partículas a través de un *potencial de contacto* para modelar las interacciones entre fermiones. Como se ha discutido en los capítulos anteriores la justificación es válida suponiendo que el gas se encuentra en un régimen de bajas temperaturas y por lo tanto la interacción entre partículas está descrita en la aproximación de onda s usando un único parámetro que es la longitud de dispersión a . Las dificultades que surgen con este tipo de potencial son divergencias en la ecuación del gap y algunos términos de la energía, sin embargo estas divergencias se pueden eliminar al *renormalizar* la interacción [Huang and Yang, 1957][Parish, 2014]. Por otra parte, en experimentos recientes con gases de Fermi muestran que las interacciones en un gas de Fermi cerca de las resonancias de Feshbach no pueden ser caracterizadas por un solo parámetro [Hazlett et al., 2012] y surge la necesidad de investigar más a detalle los posibles efectos al emplear un modelo de potencial más adecuado a las interacciones entre átomos. La inclusión de un potencial finito (no contacto) en el modelo del crossover ha sido discutido en diferentes trabajos previos, por ejemplo: [Caballero-Benítez et al., 2013], [Parish et al., 2005], [Jensen et al., 2006]; en este trabajo se hace un estudio del crossover empleando diferentes potenciales de interacción que ya han sido descritos en el capítulo 4. En este capítulo se reportan los resultados obtenidos de las propiedades termodinámicas al introducir los potenciales de interacción analizados y se comparan con los resultados conocidos del modelo de potencial de contacto. Se pone especial énfasis en el potencial químico, el gap y la presión del gas al variar el inverso de la longitud de dispersión.

6.1. Relaciones termodinámicas.

De acuerdo al modelo del crossover, en un gas de fermiones interactuantes, la transición de un régimen BCS a un régimen BEC (condensado de Bose-Einstein) se produce al modificar la longitud de dispersión o de manera más precisa el inverso de la longitud de dispersión: $\eta \equiv 1/a$. Así, desde el punto de vista de la termodinámica η representa una variable de estado “adicional”

al gas de Fermi capaz de modificarse externamente y que esta relacionada con la interacción entre las partículas del gas. Esta variable debe ser intensiva, ya que si se divide al sistema entero en pequeños subsistemas las propiedades de interacción entre las partículas en cada uno de estos subsistemas no tienen por que cambiar, es una propiedad de interacción entre las partículas y no del tamaño del sistema. De esta manera, de acuerdo al formalismo de la termodinámica, se deduce la existencia de la variable conjugada de η y que se denomina el *contacto* \mathcal{C} , esta variable es a su vez extensiva (η es intensiva); se puede verificar que las dimensiones del contacto son de energía multiplicada por longitud.

Tomando en cuenta el par de variables termodinámicas, η , \mathcal{C} , por efecto de la interacción entre las partículas y la posibilidad de variar una de ellas externamente, la ecuación de Euler y de Gibbs se expresan como:

$$\begin{aligned} E &= TS - pV + \mu N + \eta\mathcal{C}, \\ dE &= TdS - pdV + \mu dN + \eta d\mathcal{C}. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Ambas ecuaciones establecen que la energía interna del gas en su representación fundamental es función de las variables extensivas: S, V, N, \mathcal{C} ; es decir: $E = E(S, V, N, \mathcal{C})$. De esta manera, el gran potencial $\Omega(T, V, \mu, \eta)$ quedara definido por la siguiente transformación de Legendre:

$$\Omega(T, V, \mu, \eta) = E - TS - \mu N - \eta\mathcal{C}, \quad (6.2)$$

es importante notar la transformación adicional, $-\eta\mathcal{C}$, para que el gran potencial sea función de η y no del contacto \mathcal{C} . Sustituyendo esta definición del gran potencial en la ecuación de Euler se obtiene la siguiente relación:

$$\Omega = -pV. \quad (6.3)$$

Por otra parte, diferenciando la definición del gran potencial (6.2) y utilizando la ecuación de Gibbs se obtiene la diferencial del gran potencial:

$$d\Omega = -SdT - Nd\mu - pdV - \mathcal{C}d\eta, \quad (6.4)$$

a partir de la cual se obtiene el conjunto de ecuaciones que relacionan todas las variables del sistema:

$$\begin{aligned} -N(T, \mu, \eta) &= \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V, \eta}, & -S(T, \mu, \eta) &= \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \mu, \eta}, \\ -p(T, \mu, \eta) &= \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T, \mu, \eta}, & -\mathcal{C}(T, \mu, \eta) &= \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \eta} \right)_{T, V, \mu}, \end{aligned} \quad (6.5)$$

Este conjunto de ecuaciones determina completamente el estado termodinámico del gas. Desde un punto de vista de la termodinámica del gas, la propiedad de interacción entre las partículas del gas esta contenida en las variables conjugadas: η , \mathcal{C} , mismas que en un gas ideal

no aparecen. Una vez dicho esto es pertinente aclarar que la expresión del hamiltoniano del gas de fermiones con interacción¹: $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{int}$, ver ecuación (5.29), no corresponde estrictamente a la relación fundamental de la energía interna del gas, es decir: $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle \neq E(S, V, N, \mathcal{C})$, ya que el termino de interacción, $\hat{\mathcal{H}}_{int}$, depende implícitamente de la longitud de dispersión (o su inverso) y por lo tanto $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle$ representa el potencial termodinámico obtenido por el cambio de variable $\mathcal{C} \rightarrow \eta$, es decir: $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = E - \eta\mathcal{C}$, por lo tanto: $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \hat{\mathcal{H}}(S, V, N, \eta)$. Con esta identificación, el gran potencial corresponde a la siguiente expresión:

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle - T\langle \hat{S} \rangle - \mu\langle \hat{N} \rangle = E - \eta\mathcal{C} - \mu N - TS \quad (6.6)$$

que concuerda con la definición que se dio en la ecuación (6.2) y por lo tanto no se ven afectadas la relaciones descritas anteriormente; por ejemplo, la presión se puede obtener como: $p = -\langle \hat{\Omega} \rangle / V$. Es posible seguir considerando la energía interna del gas como el valor medio del hamiltoniano² $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle$, mismo que se puede calcular de la siguiente relación: $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \langle \hat{\Omega} \rangle + \mu\langle \hat{N} \rangle + T\langle \hat{S} \rangle$. En el capítulo 2 se muestran las gráficas de las diferentes energías en función de $\tilde{\eta} = 1/ak_F$, ver figura 2.2. En la sección 6.6 se analiza la variable de contacto \mathcal{C} con el uso de un potencial de interacción finito y se muestran los resultados para el pozo de potencial y potencial exponencial, ver figura 2.3.

6.2. Sistema de ecuaciones integrales, energías.

Como ya se ha descrito en el capítulo 5 para analizar la descripción de las propiedades termodinámica del gas de Fermi en el crossover BCS-BEC se debe resolver el siguiente sistema de ecuaciones integrales (5.66):

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_H &= \frac{\tilde{U}_0}{3\pi^2} \\ \tilde{\epsilon}_F &= -\frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \frac{1}{2} \tilde{F}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R}) \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{2}\right) \right] \sqrt{x'} dx' \\ \tilde{\Delta}_x &= -\frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \tilde{F}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R}) \frac{\tilde{\Delta}_{x'}}{2\tilde{E}_{x'}} \tanh\left(\frac{\beta\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{2}\right) \sqrt{x'} dx', \\ 1 &= \frac{3}{4} \int_0^\infty \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{2}\right) \right] \sqrt{x'} dx'. \end{aligned} \quad (6.7)$$

¹ $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{int} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_H + \hat{\mathcal{H}}_F + \hat{\mathcal{H}}_p$

²Que contiene las propiedades de interacción entre partículas.

donde $\tilde{U}_0 = U_0 k_F^3 / \epsilon_F$ es la transformada de Fourier evaluada en cero y en unidades de Fermi y además:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{\mathbf{k}} &= \sqrt{(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \tilde{\mu} + \tilde{\epsilon}_H + \tilde{\epsilon}_F)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}, \\ \tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}} &= \tilde{E}_{\mathbf{k}} - \frac{\tilde{\Delta}_{\mathbf{k}}^2}{2\tilde{E}_{\mathbf{k}}} - \frac{(\tilde{\epsilon}_H + \tilde{\epsilon}_F)\tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}}{2\tilde{E}_{\mathbf{k}}}, \end{aligned} \quad (6.8)$$

Para los potenciales, pozo de potencial, potencial exponencial y de Yukawa la transformada de Fourier se puede calcular obteniendo las siguientes expresiones:

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} \frac{4\pi V_0}{q^3} [Rq \cos(qR) - \sin(qR)], & \text{pozo de potencial,} \\ -\frac{8\pi V_0 R^3}{(1 + q^2 R^2)^2}, & \text{potencial de Rarita,} \\ -\frac{4\tilde{V}_0 \tilde{R}^3}{3\pi} & \text{potencial de Yukawa,} \end{cases} \quad (6.9)$$

evaluando en cero, se obtienen las siguientes expresiones para la energía de Hartree:

$$\tilde{\epsilon}_H = \begin{cases} -\frac{4\tilde{V}_0 \tilde{R}^3}{9\pi} & \text{pozo de potencial,} \\ -\frac{8\tilde{V}_0 \tilde{R}^3}{3\pi} & \text{potencial de Rarita,} \\ -\frac{4\tilde{V}_0 \tilde{R}^3}{3\pi} & \text{potencial de Yukawa,} \end{cases} \quad (6.10)$$

se puede notar que la energía de Hartree es negativa, como era de esperar para un potencial de interacción atractivo.

Kernel de las integrales, funciones $\tilde{F}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R})$.

La función $\tilde{F}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R})$ en las ecuaciones (6.7) corresponde a la integral en todo el ángulo sólido de la transformada de Fourier:

$$F(k, k', V_0, R) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d\Omega_{\mathbf{k}} = 2\pi \int_0^\pi U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sin\theta_{\mathbf{k}} d\theta_{\mathbf{k}}, \quad (6.11)$$

y $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ es la transformada de Fourier, que para un potencial de interacción central $U(r)$, está dada por:

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} U(r) d^3r . \quad (6.12)$$

(U_0 corresponde al caso $\mathbf{k} = \mathbf{k}' = 0$). Si definimos el vector: $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ como la diferencia del vector de onda dispersada (partícula dispersada) \mathbf{k}' y el vector de onda incidente (partícula incidente) \mathbf{k} , y θ_r es el ángulo entre el vector radial \vec{r} y \mathbf{q} (ver figura 6.1).

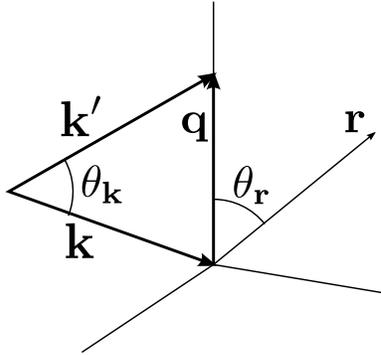


Figura 6.1: Descripción de los vectores: \mathbf{k} , \mathbf{k}' , \mathbf{q} y de los ángulos θ_r , θ_k

La transformada de Fourier se escribe como:

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \int e^{i\mathbf{q}\cdot\vec{r}} U(\mathbf{r}) d^3r = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} e^{i\mathbf{q}\cdot\vec{r}} U(\mathbf{r}) r^2 \sin\theta_r dr d\theta_r d\varphi_r , \quad (6.13)$$

y para un potencial esférico se llega al siguiente resultado:

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{4\pi}{q} \int_0^{\infty} rU(r) \sin(qr) dr, \quad (6.14)$$

donde la dependencia con los vectores: \mathbf{k} , \mathbf{k}' y del ángulo entre ellos θ_k , esta dada a través de la siguiente expresión:

$$q = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos\theta_k}, \quad (6.15)$$

en el caso: $k = k'$, se reduce a: $q = 2k \sin(\theta_k/2)$.

Para un potencial esférico que se pueda expresar de la forma: $U(r) = V_0 f(r/R)$ sustituyendo la expresión (6.14) en la ecuación (6.11) y realizando un cambio de variable en el ángulo θ_k se puede escribir el siguiente resultado:

$$F(k, k', V_0, R) = -\frac{8\pi^2 V_0}{kk'} \int_0^\infty f(r/R) [\cos(y_2) - \cos(y_1)] dr, \quad \begin{array}{l} y_1 \equiv r|k - k'| \\ y_2 \equiv r|k + k'| \end{array} \quad (6.16)$$

Se puede observar que la función F es proporcional a la profundidad (o intensidad) del potencial de interacción V_0 y a una función que depende del alcance R y k, k' . Se puede notar que las dimensiones de la función F son: energía · volumen, mismas dimensiones que la transformada de Fourier del potencial de interacción, ya que el integrando es adimensional y por lo tanto en unidades de Fermi se expresa como:

$$\tilde{F}(x, x', \tilde{V}_0, R) = -\frac{8\pi^2 \tilde{V}_0}{xx'} \int_0^\infty f(\tilde{r}/\tilde{R}) [\cos(y_2) - \cos(y_1)] dr, \quad \begin{array}{l} y_1 \equiv \tilde{r}|x - x'| \\ y_2 \equiv \tilde{r}|x + x'| \end{array} \quad (6.17)$$

donde $x = k/k_F$ y las variables con tilde, como siempre están en unidades de Fermi.

Para los potenciales de interacción atractivos considerados en este trabajo: pozo de potencial (sw), exponencial o Rarita (exp) y Yukawa (Yuk), se obtienen las siguientes expresiones para la función \tilde{F} :

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{\text{sw}}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R}) &= \frac{8\pi \tilde{V}_0 \tilde{R}}{\sqrt{xx'}} \left(\frac{\text{sen } Y_2}{Y_2^2} - \frac{\text{sen } Y_1}{Y_1^2} \right), \\ \tilde{F}_{\text{exp}}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R}) &= \frac{8\pi \tilde{V}_0 \tilde{R}}{\sqrt{xx'}} \left(\frac{1}{1 + Y_2^2} - \frac{1}{1 + Y_1^2} \right), \\ \tilde{F}_{\text{Yuk}}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R}) &= \frac{8\pi \tilde{V}_0 \tilde{R}}{\sqrt{xx'}} \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1 + Y_1^2}{1 + Y_2^2} \right), \end{aligned} \quad (6.18)$$

mientras que para los potenciales del tipo atractivo más una barrera V_b : dipolar (dip) y van der Waals (vdW), las expresiones son las siguientes:

$$\begin{aligned}
\tilde{F}_{\text{dip}}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R}) &= -\tilde{F}_{\text{sw}}(x, x', \tilde{V}_b, \tilde{R}) + \frac{8\pi^2 V_0 R}{kk'} \frac{1}{2} \left\{ \cos Y_2 - Y_2 \text{sen } Y_2 + Y_2^2 \text{Ci}(Y_2) + \right. \\
&\quad \left. - \cos Y_1 + Y_1 \text{sen } Y_1 - Y_1^2 \text{Ci}(Y_1) \right\} \\
\tilde{F}_{\text{vdW}}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R}) &= -\tilde{F}_{\text{sw}}(x, x', \tilde{V}_b, \tilde{R}) + \frac{8\pi^2 V_0 R}{kk'} \left\{ \left[\left(\frac{1}{5} - \frac{Y_2^2}{60} + \frac{Y_2^4}{120} \right) \cos(Y_2) + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \left(-\frac{Y_2}{20} + \frac{Y_2^3}{120} \right) \text{sen } Y_2 - \frac{Y_2^5}{120} \left[\frac{\pi}{2} - \text{Si}(Y_2) \right] \right] + \right. \\
&\quad \left. - \left[\left(\frac{1}{5} - \frac{Y_1^2}{60} + \frac{Y_1^4}{120} \right) \cos(Y_1) + \left(-\frac{Y_1}{20} + \frac{Y_1^3}{120} \right) \text{sen } Y_1 + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{Y_1^5}{120} \left[\frac{\pi}{2} - \text{Si}(Y_1) \right] \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{6.19}$$

Donde: $Y_1 = \tilde{R}|\sqrt{x} - \sqrt{x'}|$ y $Y_2 = \tilde{R}|\sqrt{x} + \sqrt{x'}|$ en ambos casos. La función \tilde{F}_{sw} es la misma que del pozo de potencial con signo negativo y se debe a la barrera de potencial \tilde{V}_b . En el caso del potencial dipolar y van der Waals (más barrera) las funciones seno y coseno integral esta definidas por la siguientes expresiones³:

$$\text{Si}(z) \equiv \int_0^z \frac{\text{sen } t}{t} dt, \quad \text{Ci}(z) \equiv -\int_z^\infty \frac{\cos z}{z} dz; \tag{6.21}$$

se puede verificar que se satisface la siguiente propiedad: $\int_x^\infty \frac{\text{sen } t}{t} dt = \frac{\pi}{2} - \text{Si}(x)$, misma que se emplea para llegar al resultado de la función \tilde{F}_{vdW} .

6.3. Crossover, potencial de interacción finito.

El sistema de ecuaciones (6.7) resuelve los valores del gap, la energía de Hartree-Fock y el potencial químico: $\tilde{\Delta}$, $\tilde{\epsilon}_H$, $\tilde{\epsilon}_F$, $\tilde{\mu}$, en función de los parámetros del potencial de interacción (\tilde{V}_0 ,

³En principio, para cualquier potencial de la forma V_0/r^n , con $n > 2$ se puede calcular la función $\tilde{F}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R})$ empleando la siguiente relación:

$$\int_a^\infty \frac{\cos z}{z^n} dz = -\frac{\cos a}{(1-n)a^{n-1}} - \frac{\text{sen } a}{(1-n)(2-n)a^{n-2}} - \frac{1}{(1-n)(2-n)} \int_a^\infty \frac{\cos z}{z^{n-2}} dz \tag{6.20}$$

\tilde{R}), a partir de estos valores se calculan los términos de la energía:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{H}}_K &= \frac{3}{4}N \int_0^\infty (\tilde{x} - \tilde{\mu}) \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_x}{\tilde{E}_x} \tanh\left(\frac{\beta \mathcal{E}_x}{2}\right) \right] \sqrt{x} dx, \\
\tilde{\mathcal{H}}_H &= \frac{\tilde{\epsilon}_H}{2}N, \\
\tilde{\mathcal{H}}_F &= \frac{3}{8}N \int_0^\infty \tilde{\epsilon}_F(x) \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_x}{\tilde{E}_x} \tanh\left(\frac{\beta \mathcal{E}_x}{2}\right) \right] \sqrt{x} dx, \\
\tilde{\mathcal{H}}_p &= -\frac{3}{4}N \int_0^\infty \frac{\tilde{\Delta}_x^2}{2\tilde{E}_x} \tanh\left(\frac{\beta \mathcal{E}_x}{2}\right) \sqrt{x} dx.
\end{aligned} \tag{6.22}$$

y el gran potencial:

$$\Omega(T, V, \mu) = -\frac{3}{2}N\tilde{T} \int_0^\infty \ln\{1 + e^{-\beta \mathcal{E}_k}\} \sqrt{x} dx + \frac{3}{4}N \int_0^\infty \left[\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_k - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F)}{2} \right] \sqrt{x} dx. \tag{6.23}$$

De acuerdo al modelo del crossover BCS-BEC la variación del inverso de la longitud de dispersión $\tilde{\eta} = 1/\tilde{a}$ conduce al gas de un estado BCS a un gas BEC. En el modelo propuesto en este trabajo los parámetros de caracterizan la interacción son los dos parámetros del potencial de interacción ($\tilde{R}\tilde{V}_0$) y de igual manera determinan las propiedades termodinámicas del gas. Sin embargo hay una dependencia de la longitud de dispersión con los parámetros del potencial: $\tilde{a}(\tilde{R}, \tilde{V}_0)$, para el pozo de potencial y exponencial se cuenta con las expresiones 4.74 y 4.83, respectivamente, para los demás potenciales se calcula numéricamente la longitud de dispersión en función de los parámetros del potencial.

Las expresiones 4.74 y 4.83 en unidades de Fermi se expresan de la siguiente manera⁴:

$$\begin{aligned}
\text{pozo de potencial:} \quad \tilde{a}_{\text{sw}}(\tilde{\chi}) &= \tilde{R} \left[1 - \frac{\tan(\tilde{\chi}/\sqrt{2})}{\tilde{\chi}/\sqrt{2}} \right] \\
\text{potencial exponencial:} \quad \tilde{a}_{\text{exp}}(\tilde{\chi}) &= -2\tilde{R} \left[\frac{\pi N_0(\sqrt{2}\tilde{\chi})}{2 J_0(\sqrt{2}\tilde{\chi})} - \ln\left(\frac{\tilde{\chi}}{\sqrt{2}}\right) - \gamma \right],
\end{aligned} \tag{6.24}$$

donde: $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$. En la figura 6.2 se muestran las gráficas del inverso de la longitud de dispersión $\tilde{\eta} = 1/\tilde{\eta}$ para los potenciales atractivos: pozo de potencial (U_{sw}), potencial exponencial (U_{exp}) y potencial de Yukawa (U_{Yuk}); por otra parte, en la figura 6.3 se muestran las gráficas

⁴Es importante notar que las unidades de Fermi tienen como parámetro la masa m de las partículas individuales, es decir: $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2/2m$; sin embargo en el análisis de la dispersión de dos cuerpos se emplea la masa reducida, suponiendo que las partículas tienen igual masa: $m_r = m/2$.

para los potenciales dipolar-barrera y van der Waals-barrera considerando dos casos: $\tilde{V}_b = 0, \tilde{V}_0$. En todos los casos se consideran los valores del alcance: $\tilde{R} = 0.01, 0.05, 0.1, 0.5$.

De las gráficas $\tilde{\eta}$ vs $\tilde{\chi}$ se pueden observar que hay un intervalo acotado en la variable $\tilde{\chi}$, diferente para cada potencial, en el cual la variable $\tilde{\eta}$ pasa por todos sus valores posibles: $[-\infty, +\infty]$; por otra parte, el cambio de signo en $\tilde{\eta}$, es decir $\tilde{\eta} = 0$, y que corresponde a la divergencia de la longitud de dispersión, se presenta en un valor fijo $\tilde{\chi}$ aunque diferente para cada potencial. En la tabla 6.1 se presentan los valores de $\tilde{\chi}$ para $\tilde{\eta} \rightarrow \pm\infty$ y $\tilde{\eta} = 0$ de cada potencial de interacción; estos valores se calculan numéricamente a partir de las ecuaciones (6.24) para el pozo de potencial y potencial exponencial, en los demás casos se determinan acotándolos numéricamente.

potencial de interacción	$\tilde{\chi}(\tilde{\eta} \rightarrow -\infty)$	$\tilde{\chi}(\tilde{\eta} = 0)$	$\tilde{\chi}(\tilde{\eta} \rightarrow +\infty)$
pozo de potencial (sw)	0	$\pi/\sqrt{2}$	6.35
potencial exponencial (exp)	0	1.7	3.31
potencial de Yukawa (Yuk)	0	1.83	3.0
potencial dipolar - barrera, $\tilde{V}_b = 0$ (dip)	0	1.7	depende de \tilde{R}
potencial dipolar - barrera, $\tilde{V}_b = \tilde{V}_0$, (dip)	0	1.9	depende de \tilde{R}
van der Waals - barrera, $\tilde{V}_b = 0$, (vdW)	0	3.0	—
van der Waals - barrera, $\tilde{V}_b = \tilde{V}_0$, (vdW)	0	4.9	12

Cuadro 6.1: Valores de $\tilde{\chi}$, para cada potencial de interacción,

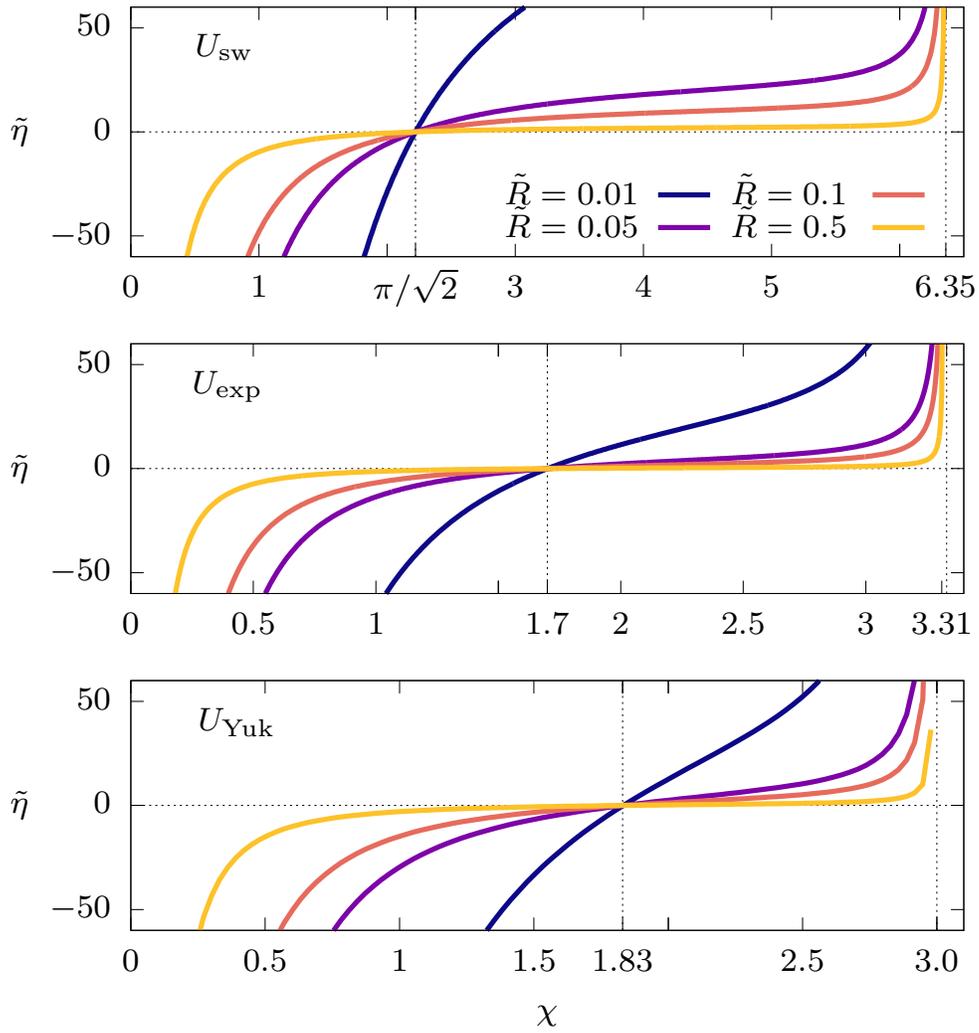


Figura 6.2: Curvas del inverso de la longitud de dispersión, $\tilde{\eta} = 1/\tilde{a}$, como función de la variable $\tilde{\chi}$ para los potenciales de interacción dipolar-barrera y van der Waals-barrera, calculada numéricamente.

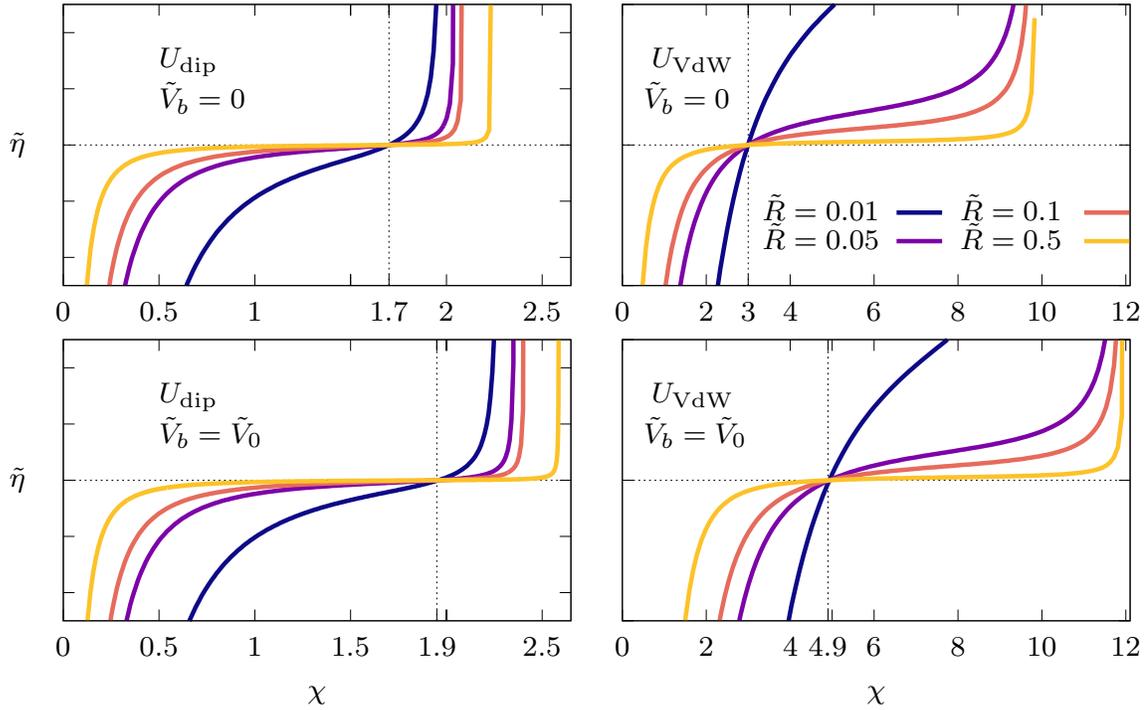


Figura 6.3: Curvas de $\tilde{\eta}$ ($1/ak_F$) como función de la variable $\tilde{\chi}$ para los potenciales de interacción dipolar-barrera y van der Waals-barrera, calculada numéricamente.

La definición de la variable: $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$ y el intervalo de valores presentados en la tabla (6.1) permiten plantear el modelo de crossover, para un potencial finito, de la siguiente manera: para variar de manera continua el inverso de la longitud de dispersión $\tilde{\eta}$ en el intervalo $[-\infty, \infty]$ se considera un alcance \tilde{R} constante y se varía la intensidad del potencial \tilde{V}_0 , en principio desde cero, hasta un valor máximo determinado por el valor $\tilde{\chi}$ para el cual $\tilde{\eta} \rightarrow \infty$, de acuerdo a la tabla (6.1). Por ejemplo, para el pozo de potencial y un alcance $\tilde{R} = 0.1$ el valor máximo de \tilde{V}_0 está dado por: $\tilde{V}_0 = (6.35/0.1)^2 = 4032.25$. A continuación se presentan los resultados obtenidos.

6.4. Termodinámica con potencial finito.

Los resultados numéricos al resolver el sistema de ecuaciones se muestran en las siguientes gráficas. Primero se presentan los resultados considerando la energía de Hartree-Fock cero ($\epsilon_H = \epsilon_F = 0$ y por lo tanto: $\hat{\mathcal{H}}_H = \hat{\mathcal{H}}_F = 0$) y después se hace una discusión considerando el caso general. Los resultados que se presentan a continuación son del gap máximo⁵ ($\tilde{\Delta}_{max}$), potencial químico ($\tilde{\mu}$) y la presión ($\tilde{p}/3\pi$); estos resultados se presentan en función del inverso de la

⁵En este modelo el gap es función de k : $\tilde{\Delta} = \tilde{\Delta}(k)$

longitud de dispersión $\tilde{\eta}$ y en función de la variable $\tilde{\chi}$. Las gráficas en la variable $\tilde{\eta}$ incluyen los resultados del modelo del crossover empleando un potencial de contacto⁶ (U_{contact}) para su comparación. Respecto de las gráficas en la variable $\tilde{\chi}$ el intervalo en esta variable, como se ha mencionado antes, es diferente para cada potencial y los valores corresponde a los dados en la tabla 6.1, además se indica en líneas punteadas el valor de $\tilde{\chi}$ para el cual $\tilde{\eta}$ cambia de signo ($\tilde{\eta} = 0$) y en un recuadro se muestra con mayor detalle las curvas alrededor de este valor.

Discusión.

De las gráficas presentadas en la variable η (columna izquierda) queda claro que se recuperan los resultado del modelo del crossover con el potencial de contacto y se logra de mejor manera conforme el alcance \tilde{R} disminuye, en este caso el valor mínimo $\tilde{R} = 0.01$. Estos resultados del crossover ya han sido discutidos en el capítulo 2 pero en resumen son los siguientes:

- **Régimen BCS** (gas fermionico, límite: $\tilde{\eta} \rightarrow -\infty$). El potencial químico tiene de la energía de Fermi: $\tilde{\mu} = 1$, el gap decae exponencialmente: $\tilde{\Delta} \sim e^{-\tilde{\eta}}$ y la presión tiende al valor de un gas de Fermi ideal: $\tilde{p}/3\pi^2 = 0.4$
- **Régimen BEC** (gas de bosones moleculares, $\tilde{\eta} \rightarrow +1$): El potencial químico tiende al valor de la energía del estado ligado: $\tilde{\mu} \sim \tilde{E}_b = \hbar^2\tilde{\eta}/2m$, el gap toma la expresión: $\tilde{\Delta} \approx \tilde{\eta}^{1/2}$, la presión tiende a cero.

Es de resaltar que los resultados para el valor: $\tilde{R} = 0.5$ son lo que más discrepan del modelo de potencial de contacto, por ejemplo la presión se observa que en el lado BEC ($\tilde{\eta} > 0$) no tiende a cero como es de esperar. Esta “discrepancia” es posible que se deba a una sobreestimación del modelo ya que el valor: $\tilde{R} = 0.5$, en unidades de Fermi corresponde a la mitad del valor medio de separación entre partículas, es decir que el alcance del potencial es comparable con la distancia entre partículas y esto corresponde a un gas de Fermi altamente interactuante para el cual el modelo considerado en este trabajo no asegura sea válido.

Es importante notar que el intervalo de $\tilde{\eta}$: $[-3 : 3]$ presentado en las gráficas corresponde a un intervalo más reducido en la variable $\tilde{\chi}$ y que además depende del potencial de interacción y del alcance. Por ejemplo, para el pozo de potencial con alcance: $\tilde{R} = 0.1$ el intervalo $\tilde{\eta}$: $[-3 : 3]$ corresponde al intervalo en $\tilde{\chi}$: $[1.9:2.5]$ y para el alcance $\tilde{R} = 0.01$, el mismo intervalo de $\tilde{\eta}$ corresponde a un intervalo aún menor en $\tilde{\chi}$: $[2.19:2.24]$. En las gráfica de la variable $\tilde{\chi}$ (columna derecha) se presenta un recuadro con un intervalo menor de $\tilde{\chi}$ alrededor del valor donde $\tilde{\eta} = 0$ y que de manera aproximada corresponde al intervalo de $\tilde{\eta}$: $[-3 : 3]$ (en la variable $\tilde{\chi}$ no es posible comparar los resultados con el modelo del potencial de contacto).

Independientemente del modelo del crossover con un potencial finito el análisis que se presenta aquí se puede ver con mayor generalidad como el de un gas de Fermi con interacción a través de diferentes potenciales de interacción donde la variable $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$ representa el parámetro de la interacción, entonces se recupera el modelo del crossover al transformar los parámetros al inverso de la longitud de dispersión. Cabe mencionar que la variable $\tilde{\chi}$ puede variar sin límite alguno y aquí solo se presentan los resultados en los intervalos de $\tilde{\chi}$ definidos en la tabla (6.1).

⁶En el caso del potencial de interacción de contacto no tiene sentido la variable $\tilde{\chi}$.

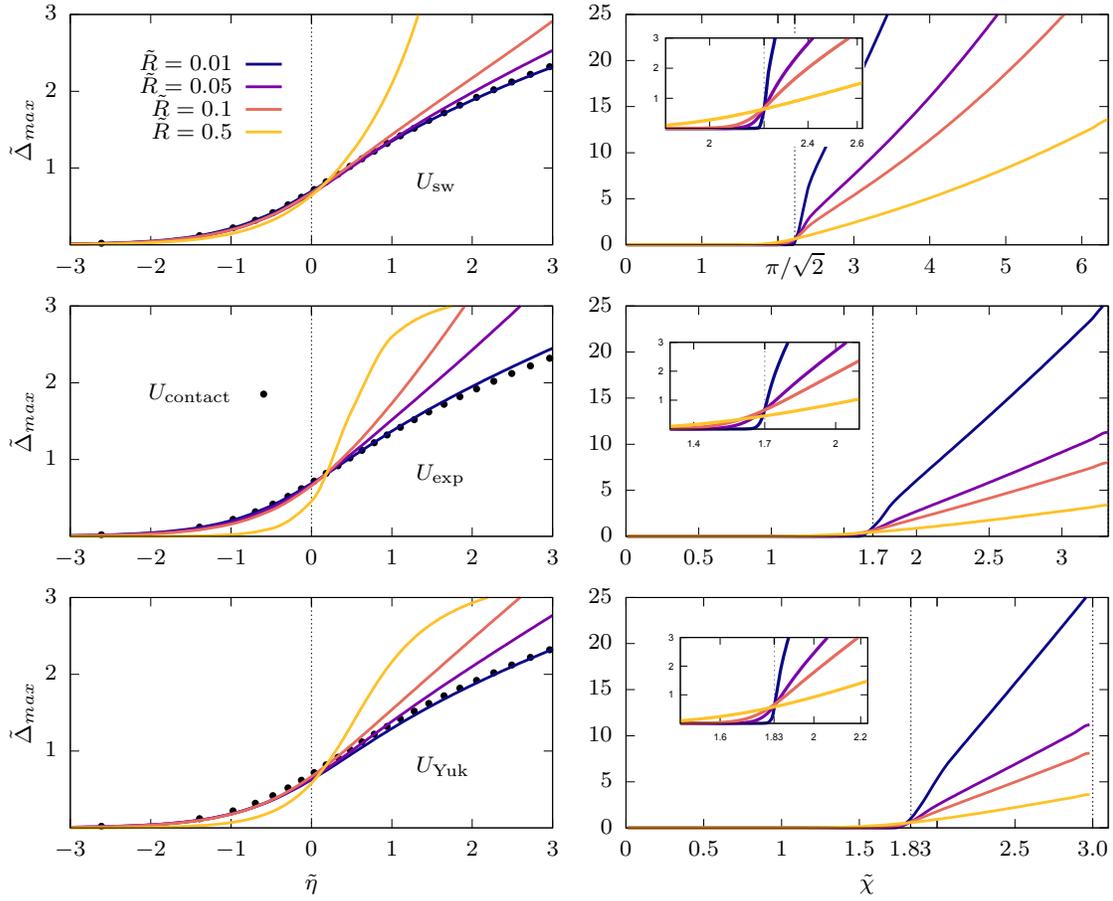


Figura 6.4: Gráfica del gap máximo, $\tilde{\Delta}_{max}$, para los tres potenciales atractivos: pozo de potencial, potencial exponencial y de Yukawa. En la columna de la izquierda se presenta el gap como función de $\tilde{\eta}$ y en la columna de la derecha como función de $\tilde{\chi}$, la línea vertical punteada corresponde al valor de $\tilde{\chi}$ para el cual $\tilde{\eta} = 0$, ver tabla 6.1.

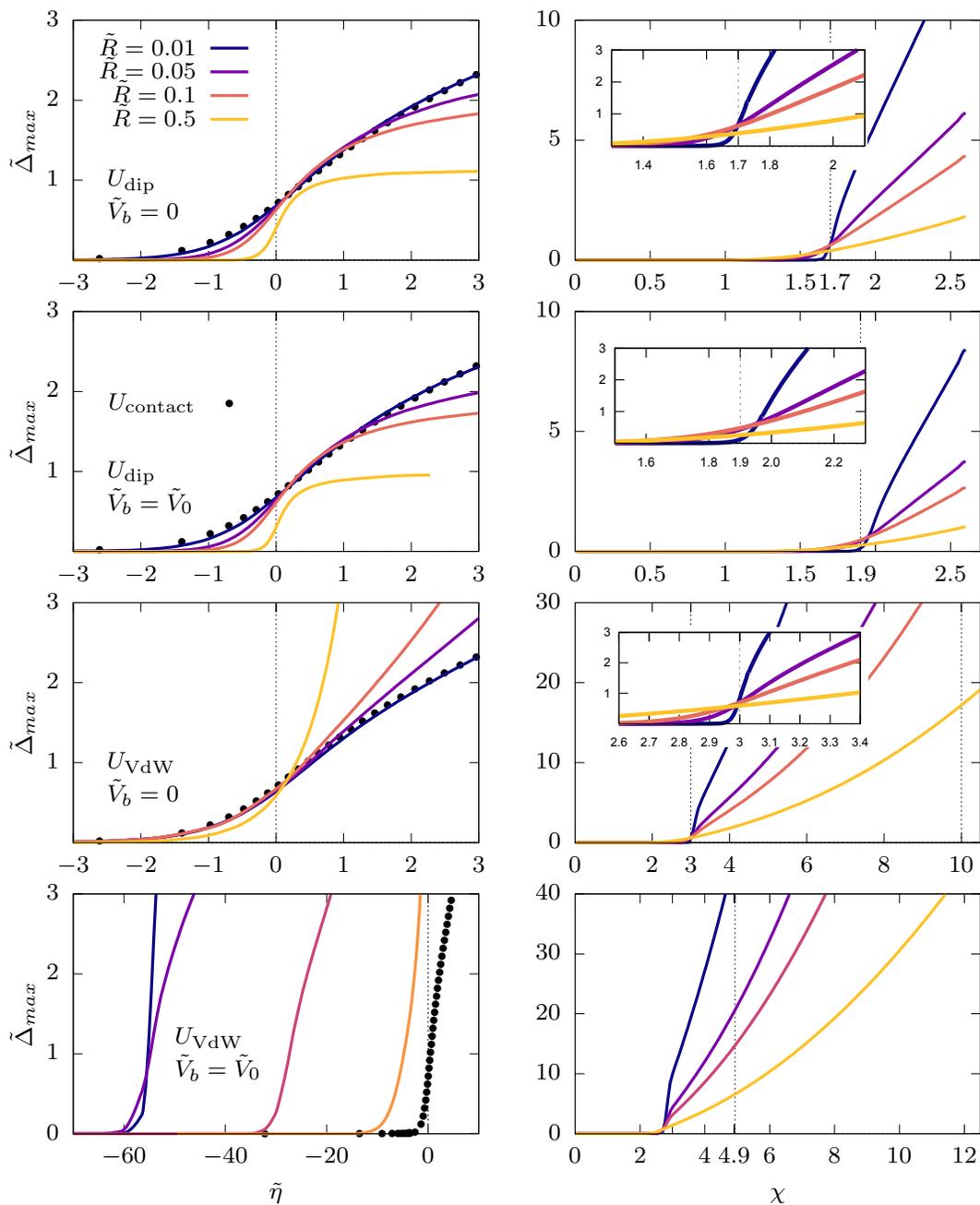


Figura 6.5: Gráfica del gap, $\tilde{\Delta}_{\mathbf{k}}$, para los diferentes potenciales; en la columna de la izquierda se presenta el gap como función de $\tilde{\eta}$ y en la columna de la derecha como función de $\tilde{\chi}$.

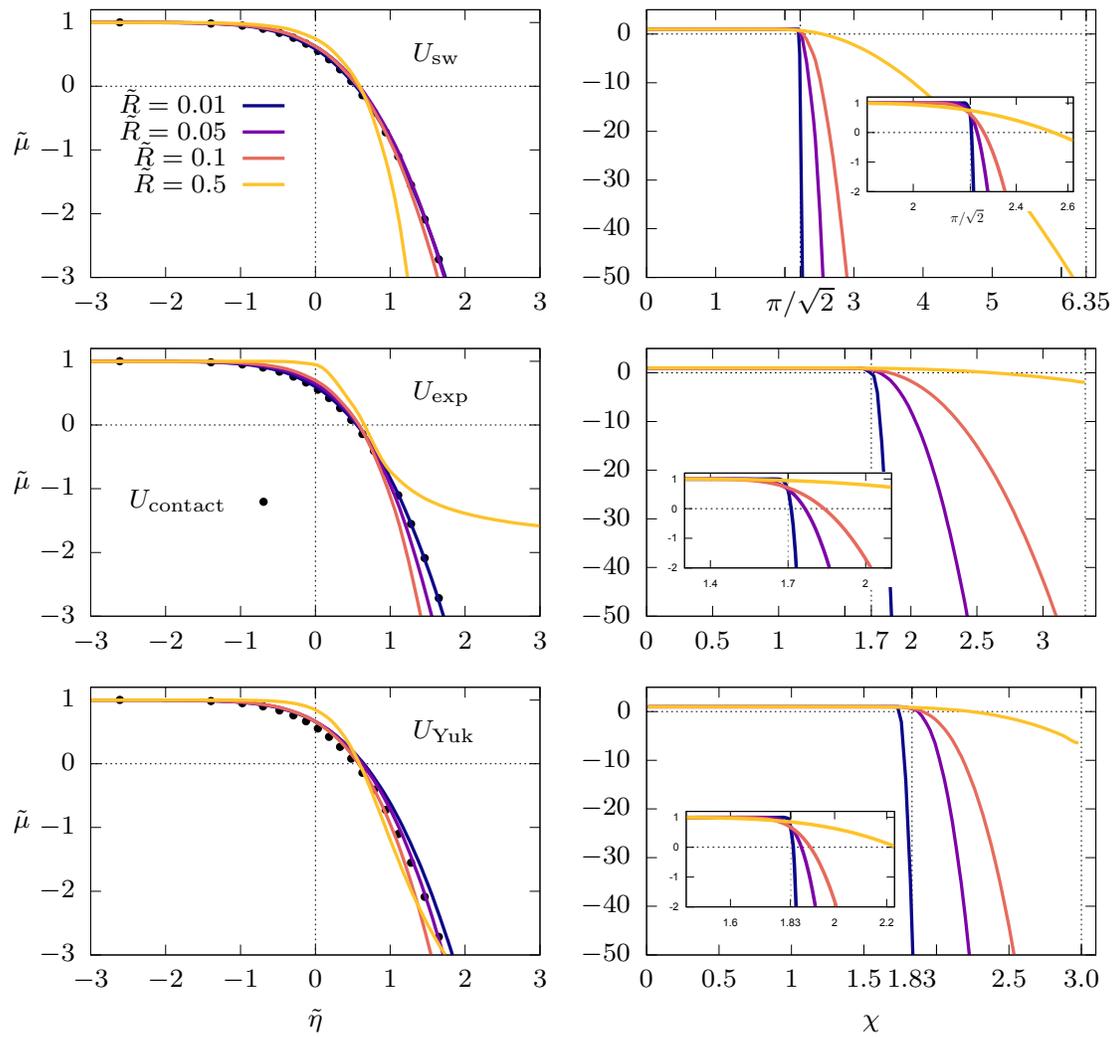


Figura 6.6: Gráfica del potencial químico, μ , para los diferentes potenciales; en la columna de la izquierda se presenta el potencial químico como función de $\tilde{\eta}$ y en la columna de la derecha como función de $\tilde{\chi}$.

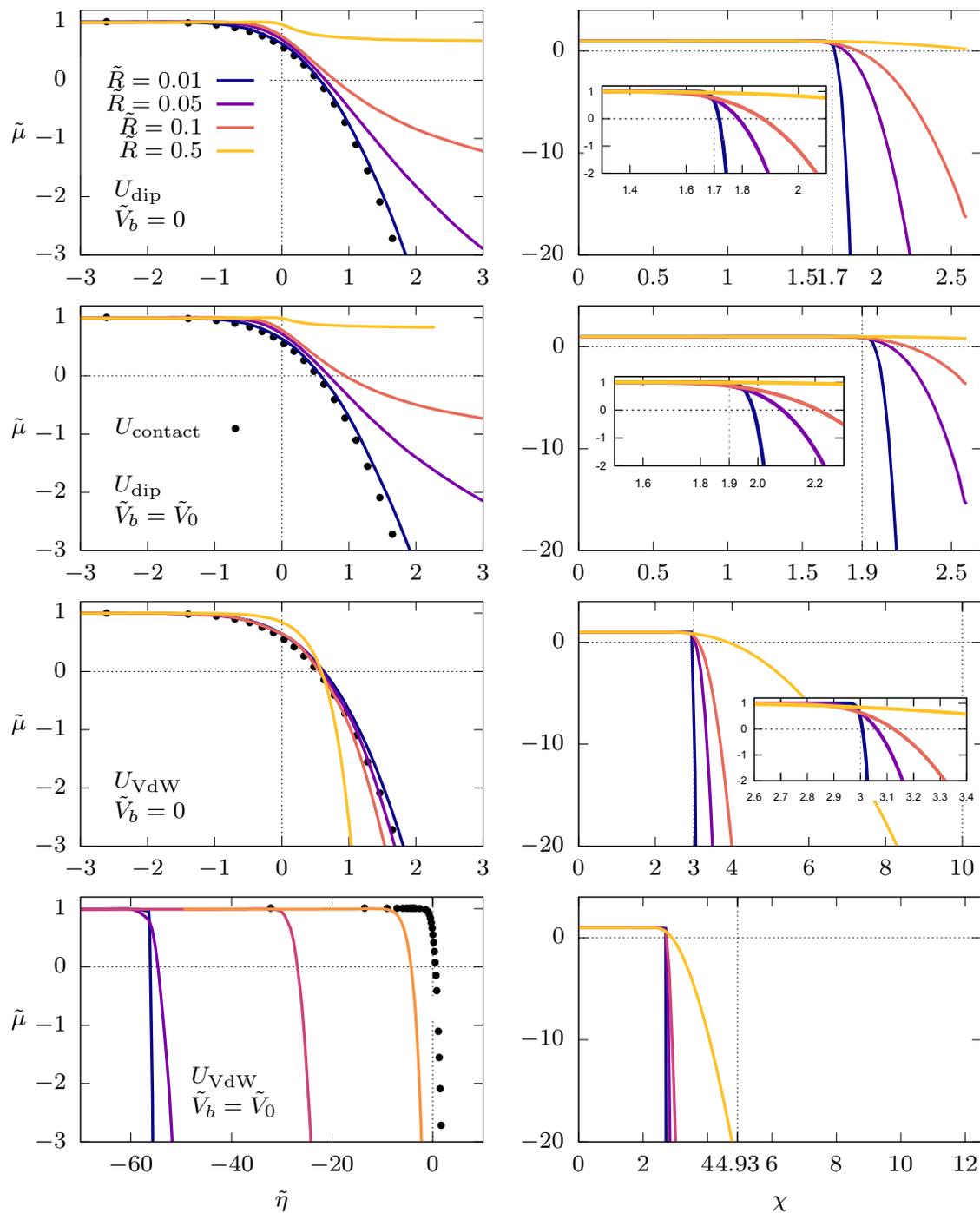


Figura 6.7: Gráfica del potencial químico, μ , para potenciales atractivos (pozo de potencial, potencial exponencial y de Yukawa). En la columna de la izquierda se presenta el potencial químico como función de $\tilde{\eta}$ y en la columna de la derecha como función de $\tilde{\chi}$.

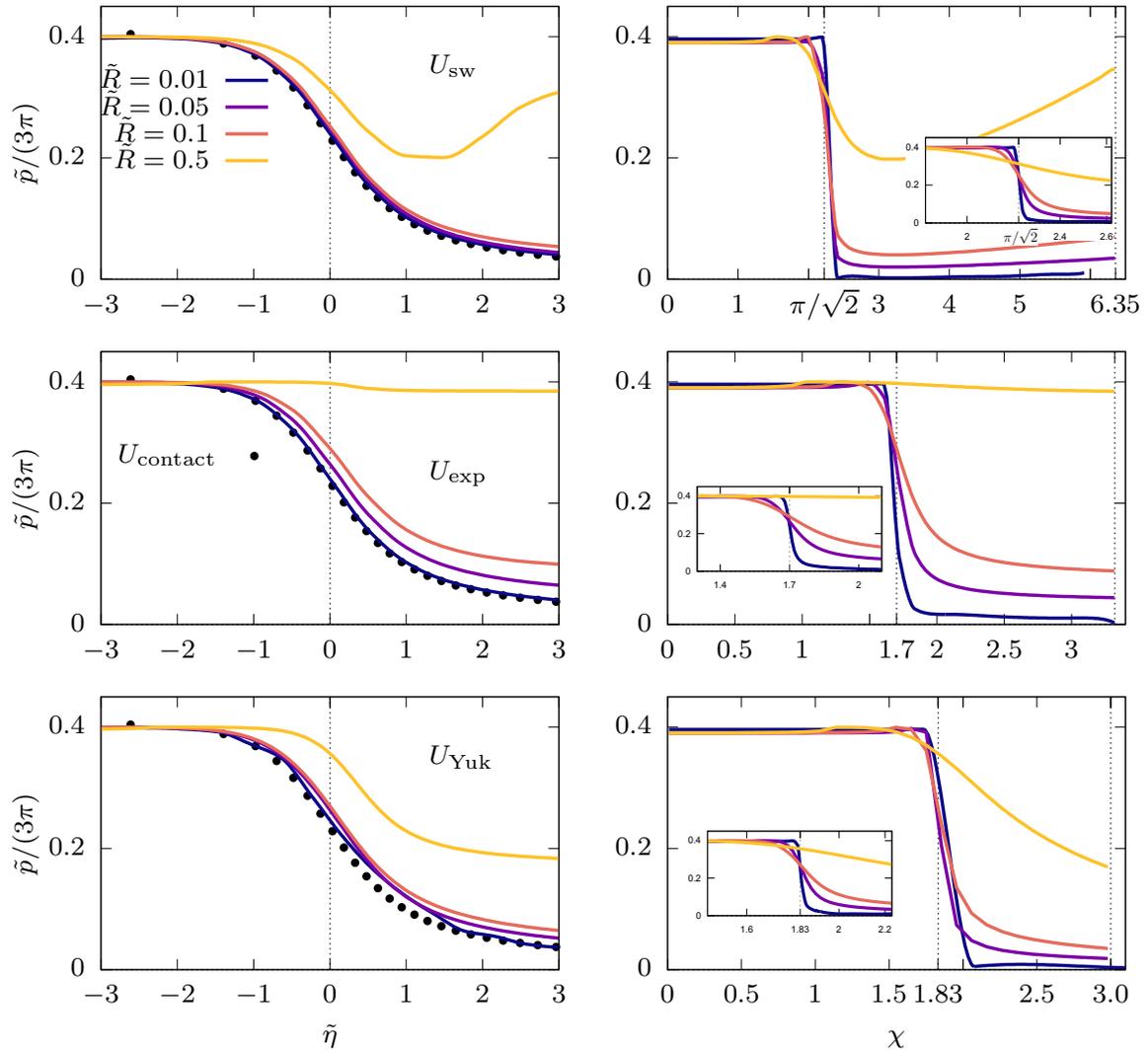


Figura 6.8: Gráfica de la presión, \tilde{p} ($\tilde{p}/(3\pi)$), para potenciales atractivos (pozo de potencial, potencial exponencial y de Yukawa). En la columna de la izquierda se presenta el potencial químico como función de $\tilde{\eta}$ y en la columna de la derecha como función de $\tilde{\chi}$.

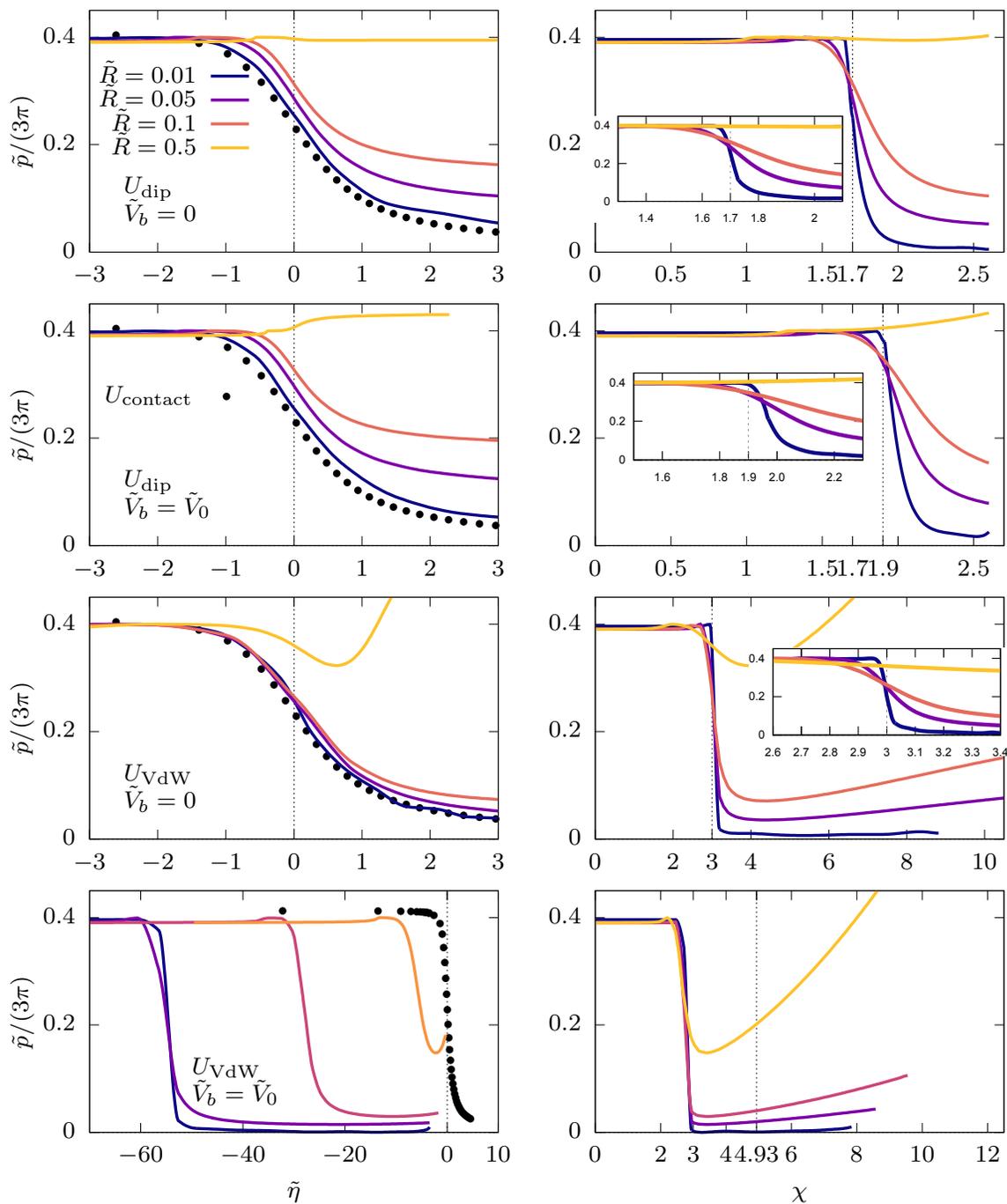


Figura 6.9: Gráfica de la presión, p ($\tilde{p}/(3\pi)$), para potenciales atractivos (pozo de potencial, potencial exponencial y de Yukawa). En la columna de la izquierda se presenta el potencial químico como función de $\tilde{\eta}$ y en la columna de la derecha como función de $\tilde{\chi}$.

Resultados con energía de Hartree-Fock.

A continuación se presentan los resultados obtenidos al incluir la energía de Hartree-Fock: $\tilde{\epsilon}_H$, $\tilde{\epsilon}_F$ en el sistema de ecuaciones (6.7) así como los términos de Hartree-Fock: $\tilde{\mathcal{H}}_H$ y $\tilde{\mathcal{H}}_F$ de la ecuación (6.22). En este caso solo se presentan los resultados para los tres potenciales atractivos (pozo de potencial, exponencial y de Yukawa), sin embargo se pudo comprobar que se obtienen resultados similares para los potenciales atractivos con barrera. El principal resultado que se obtuvo al considerar la energía de Hartree-Fock ha sido que la presión toma valores negativos, lo cual es un resultado adverso ya que la presión debe ser positiva, a partir de ciertos valores de la variable $\tilde{\chi}$, ver figura (6.10), pero donde el inverso de la longitud de dispersión es negativa $\tilde{\eta} < 0$ (la línea vertical punteada en las figuras corresponde al valor: $\tilde{\eta} = 0$) y que corresponde al lado BEC para el pozo de potencial y potencial exponencial (para los potenciales van der Waals y dipolar con barrera se obtienen resultados parecidos); sin embargo para el potencial de Yukawa la presión se hace negativa solo para el alcance $\tilde{R} = 0.1$.

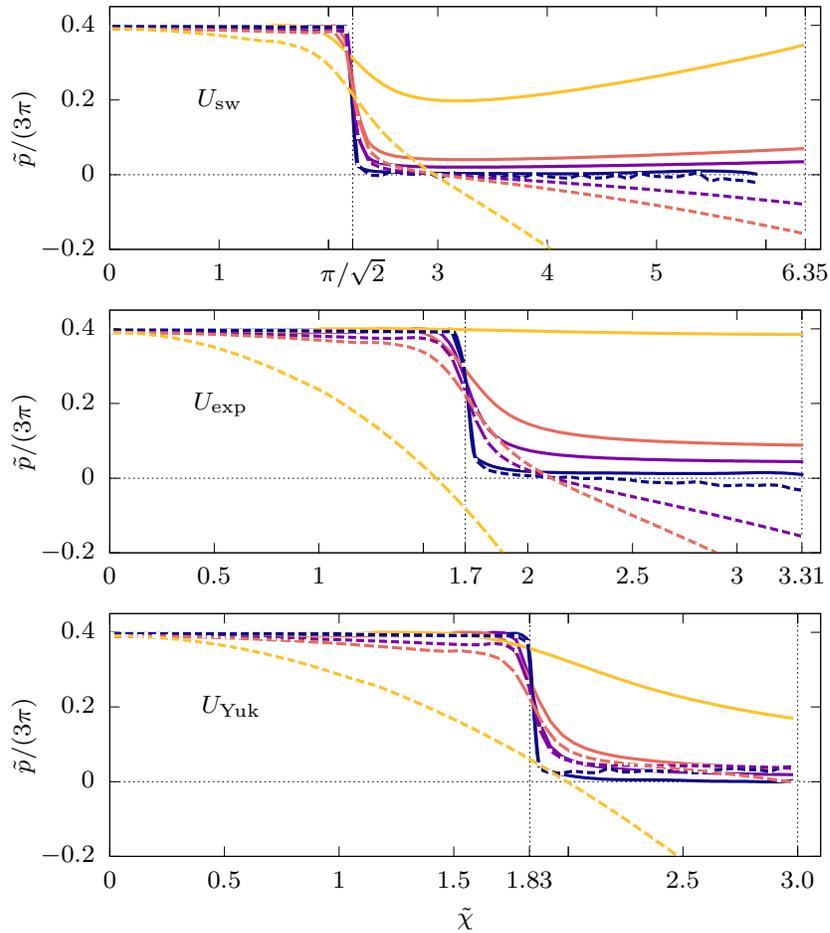


Figura 6.10: Gráficas de la presión como función de la variable $\tilde{\chi}$ para los tres potenciales de interacción atractivos: pozo de potencia, exponencial y de Yukawa. Las líneas continuas corresponden al cálculo considerando la energía de Hartree-Fock cero y las líneas punteadas considerando estas energías diferentes de cero. Se puede observar que la presión se hace negativa cuando se incluyen la energía de Hartree-Fock. La línea vertical indica el valor de $\tilde{\chi}$ para el cual $\tilde{\eta} = 0$, por lo cual se puede observar que la presión se hace negativa cuando $\tilde{\eta} > 0$.

A pesar de los valores negativos de la presión es importante hacer notar que tanto el potencial químico $\tilde{\mu}$ y el gap $\tilde{\Delta}$ (valor máximo) se mantienen sin cambios como se muestra en la figura (6.11), esto a pesar de que hay una dependencia implícita con la energía de Hartree-Fock: $\tilde{\epsilon}_H$, $\tilde{\epsilon}_F$, ver ecuaciones (6.7) y (6.8).

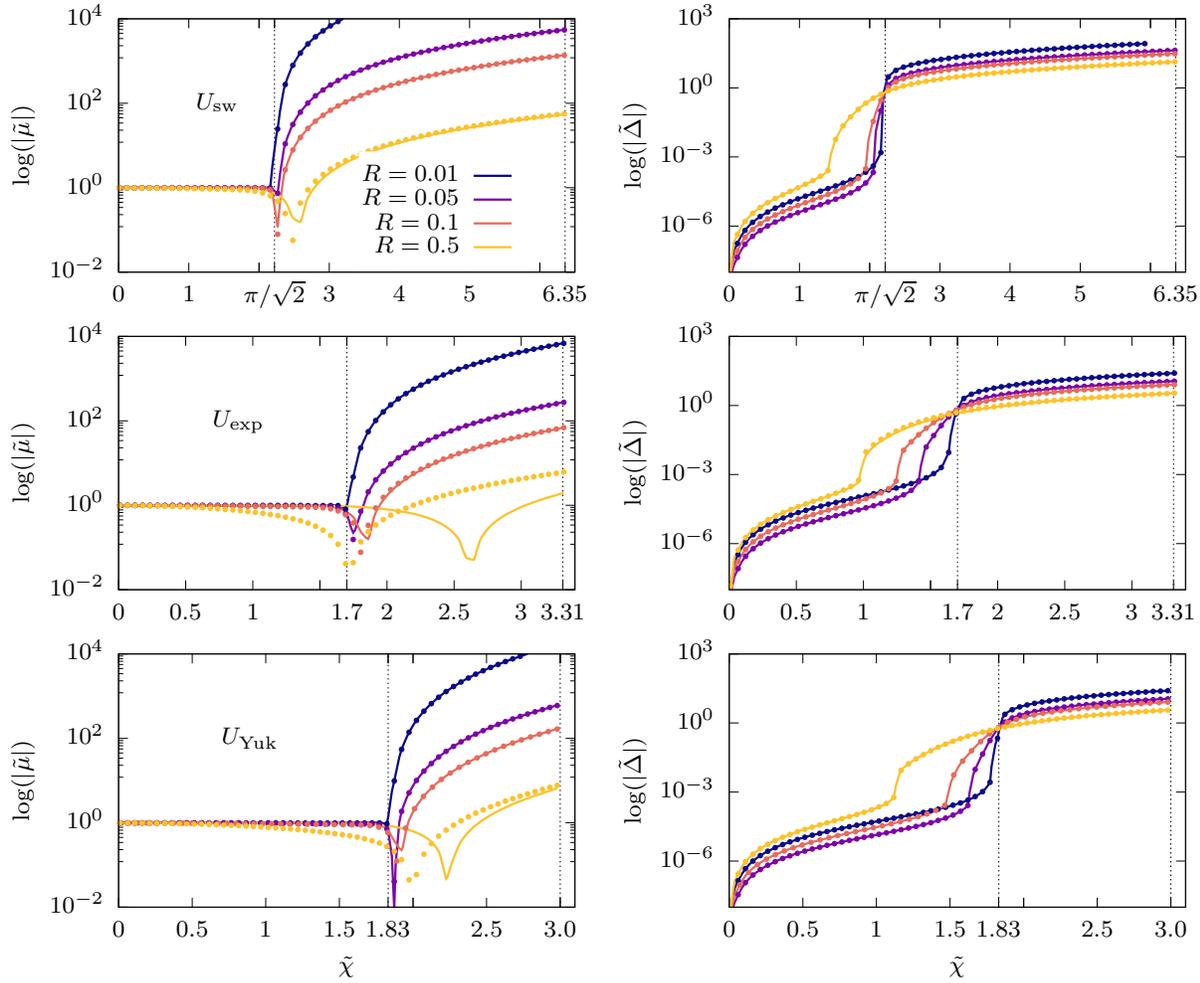


Figura 6.11: Gráficas del potencial químico $\tilde{\mu}$ y del gap $\tilde{\Delta}$ (valor máximo del gap) como función de la variable $\tilde{\chi}$ para potenciales de interacción atractivos: pozo de potencia, exponencial y de Yukawa. Las líneas continuas corresponden al cálculo considerando la energía de Hartree-Fock cero y las líneas punteadas considerando estas energías diferente de cero. Se presentan los resultado en escala logarítmica y se observa que las diferencias entre ambos resultados es mínima, excepto el potencial químico para el alcance $R = 0.1$ donde se nota una diferencia apreciable en ambos resultados.

A continuación se hace un análisis de cada uno de los términos de la energía con el fin de identificar el posible origen de la presión negativa, recordemos que la presión del gas está dada por el negativo del gran potencial, en unidades de Fermi:

$$\frac{\tilde{p}}{3\pi^2} = -\tilde{\Omega} = -\left(\tilde{\mathcal{H}}_K + \tilde{\mathcal{H}}_p + \tilde{\mathcal{H}}_H + \tilde{\mathcal{H}}_F\right) \quad (6.25)$$

donde las expresiones de cada uno de los términos se establecen en la ecuación (6.22).

▪ **Comparación términos:** $\tilde{\mathcal{H}}_H, \tilde{\mathcal{H}}_F$.

Como la energía de Hartree $\tilde{\epsilon}_H$ es proporcional a la transformada de Fourier: $\tilde{\epsilon}_H = \tilde{U}_0/3\pi^2$, entonces, en general la energía de Hartree es negativa: $\tilde{\epsilon}_H < 0$ para un potencial atractivo y por lo tanto el término de Hartree es negativo: $\tilde{\mathcal{H}}_H < 0$. Por otra parte de las siguientes definiciones: $\mathcal{E}_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \epsilon_H + \epsilon_F$ y $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$, se obtiene que en general: $1 - \tilde{\mathcal{E}}_{x'}/\tilde{E}_{x'} > 0$. Entonces, de la definición de la energía de Fock $\tilde{\epsilon}_F$, ecuación (6.7), la energía de Fock es positiva: $\tilde{\epsilon}_F > 0$, mientras la función \tilde{F} sea positiva, lo cual se corrobora para los potenciales estudiados aquí, por lo tanto el término de Fock es positivo: $\tilde{\mathcal{H}}_F > 0$. El signo de los términos de Hartree y de Fock se comprueba de los resultados obtenidos y que muestran en la figura (6.12), en la misma figura se presenta la suma de ambos términos: $\tilde{\mathcal{H}}_F + \tilde{\mathcal{H}}_H$; y se puede notar que para el pozo de potencial y exponencial la suma de ambos término es siempre negativa -y por lo tanto: $|\tilde{\mathcal{H}}_H| > |\tilde{\mathcal{H}}_F|$ -, excepto para el caso del potencial de Yukawa con los alcances: $\tilde{R} = 0.01, 0.05$, la suma toma valores positivos en cierta región de $\tilde{\chi}$, en todos los demás casos del mismo potencial la suma es siempre es negativa.

▪ **Comparación términos:** $\tilde{\mathcal{H}}_K, \tilde{\mathcal{H}}_p$

El término de pares $\tilde{\mathcal{H}}_p$ en general es negativo por el signo externo de su definición, ver última ecuación de (6.7); por otra parte, de la misma ecuación referida se puede notar que el término $\tilde{\mathcal{H}}_K$ puede tomar valores positivos o negativos dependiendo de la relación: $\tilde{x} - \tilde{\mu}$ (recordar que $\tilde{x} = \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$). En la figura (6.13) se muestran los resultados de ambos términos: $\tilde{\mathcal{H}}_K, \tilde{\mathcal{H}}_p$ así como la suma de ambos, en las gráficas se verifica que el término de pares es negativo aunque se puede apreciar que tiene un crecimiento muy rápido, mientras que el término $\tilde{\mathcal{H}}_K$ se mantiene negativo hasta valores de $\tilde{\chi}$ cercanos donde $\tilde{\eta} = 0$, después crece abruptamente. La suma de ambos términos: $\tilde{\mathcal{H}}_K + \tilde{\mathcal{H}}_p$, exceptuando los términos de Hartree y de Fock, corresponde al gran potencial y por lo tanto al negativo de la presión. Aquí lo importante de notar en la figura (6.13), columna derecha, es que aún sin los términos de Hartree-Fock, $\tilde{\mathcal{H}}_H, \tilde{\mathcal{H}}_F$, la presión tendría valores negativos por el hecho de que hay también una dependencia implícita de la energía de Hartree-Fock, $\tilde{\epsilon}_H, \tilde{\epsilon}_F$.

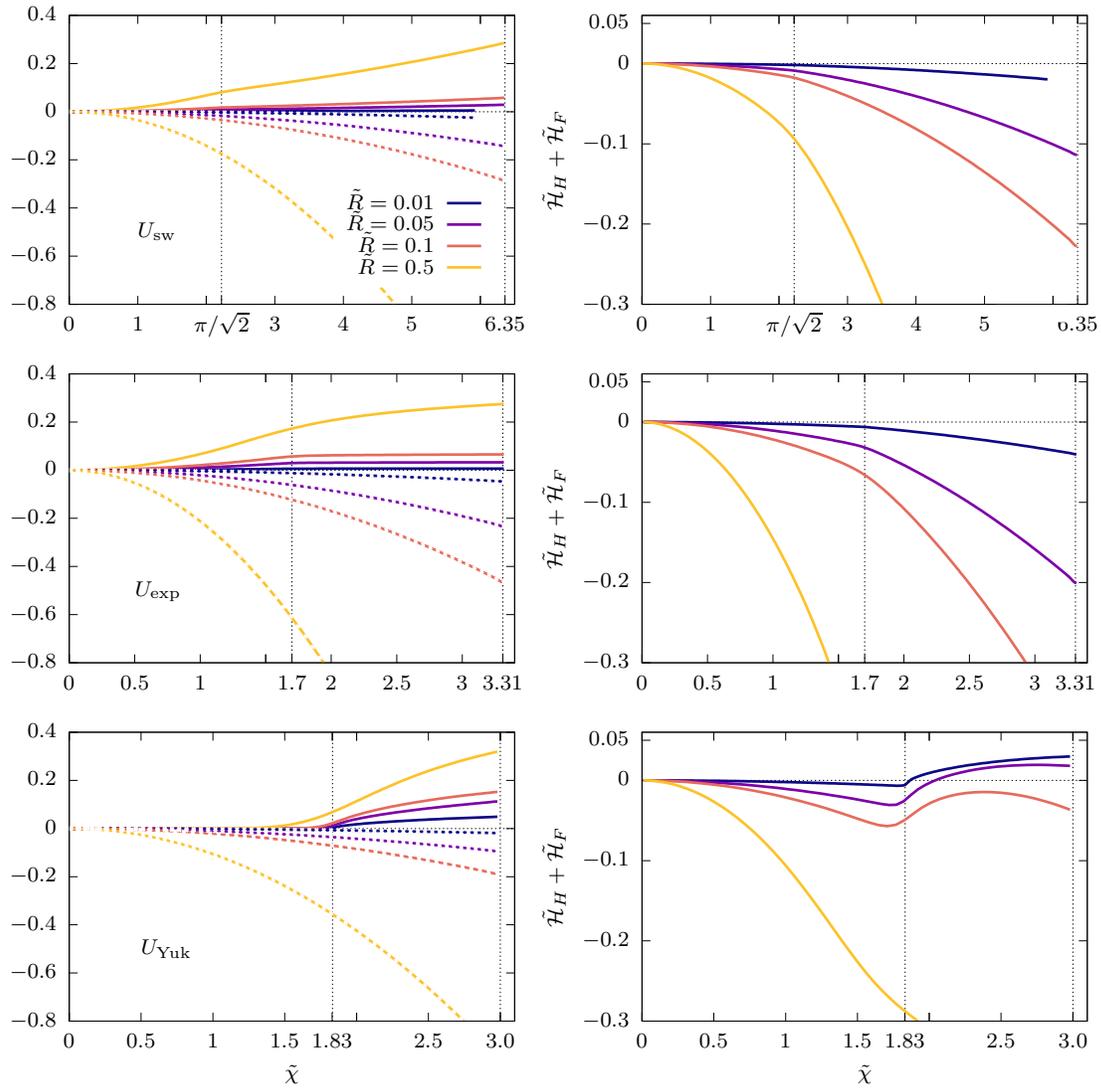


Figura 6.12: Comportamiento del término de Hartree y de Fock, la línea punteada horizontal corresponde al valor de $\tilde{\eta} = 0$. En las gráficas de la columna izquierda, las líneas continuas corresponden al término de Fock ($\tilde{\mathcal{H}}_F$) y en línea punteada al término de Hartree ($\tilde{\mathcal{H}}_H$), se verifica que el término de Hartree es negativo y el término de Fock positivo. Se puede observar que para el pozo de potencial y exponencial la suma de ambos términos: $\tilde{\mathcal{H}}_H + \tilde{\mathcal{H}}_F$ es negativo, excepto para el potencial de Yukawa en los alcances $\tilde{R} = 0.01, 0.05, 0.5$.

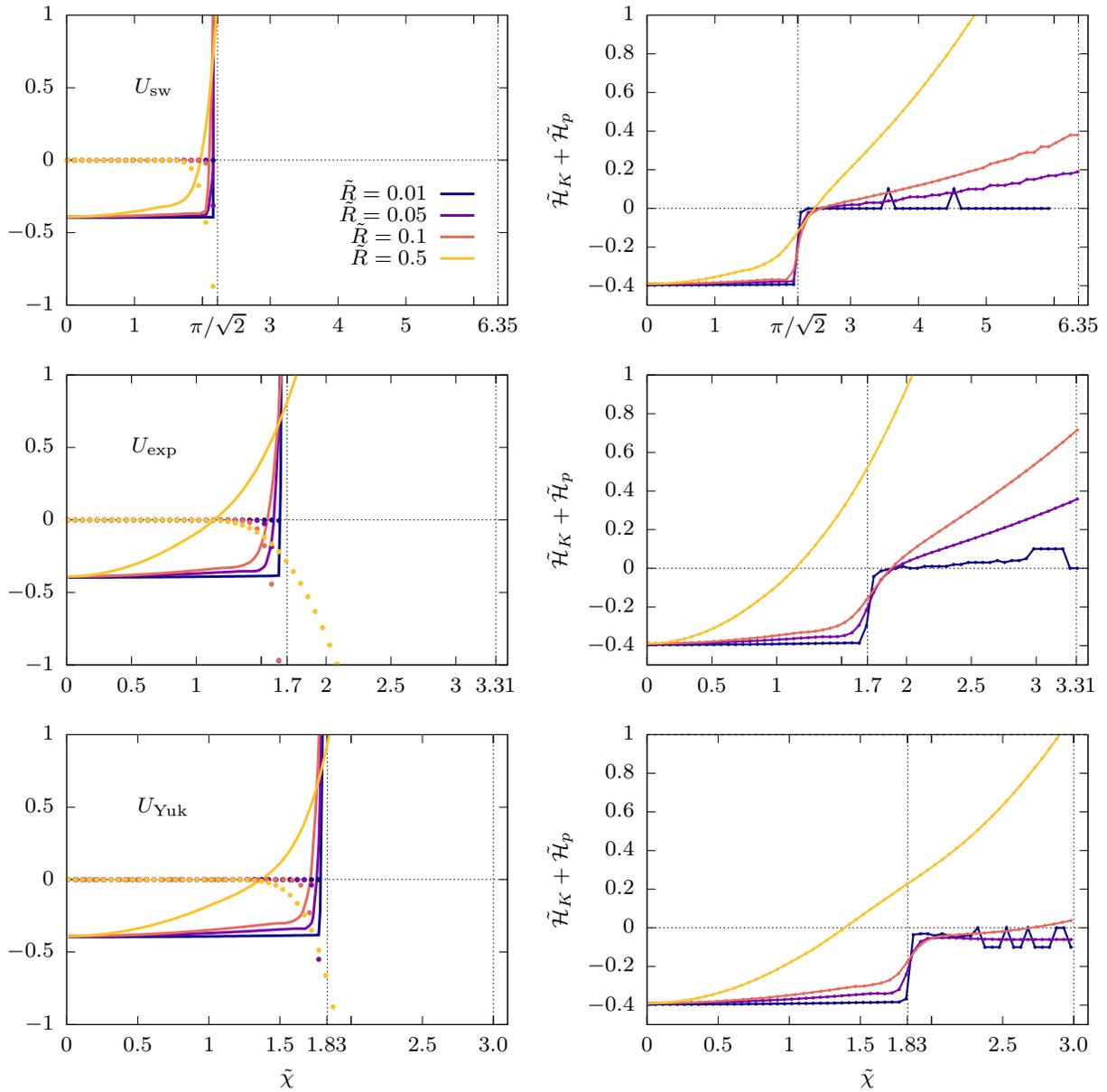


Figura 6.13: Comportamiento del término de energía libre y de pares, la línea punteada horizontal corresponde al valor de $\tilde{\eta} = 0$. En la columna de la izquierda, las líneas continuas corresponden a la energía libre: $\tilde{\mathcal{H}}_K = \tilde{\mathcal{H}}_0 - \tilde{\mu}N$ y en líneas punteadas al término de pares: $\tilde{\mathcal{H}}_p$. Se puede observar que $\tilde{\mathcal{H}}_K$ es negativa y $\tilde{\mathcal{H}}_p$ aproximadamente cero para valores de $\tilde{\chi}$ tales que $\tilde{\eta}$ es negativa (lado BCS) y hay un cambio abrupto en ambos términos cerca del valor de $\tilde{\chi}$ donde $\tilde{\eta} = 0$. La columna de la derecha corresponde a la suma de ambos términos: $\tilde{\mathcal{H}}_K + \tilde{\mathcal{H}}_p$, esta cantidad es importante ya que, exceptuando los términos de Hartree-Fock, representa al gran potencial (negativo de la presión).

- **Comparación términos:** $\tilde{\mathcal{H}}_K + \tilde{\mathcal{H}}_p$, $\tilde{\mathcal{H}}_K + \tilde{\mathcal{H}}_p$.

Finalmente, en la figura (6.14) se hace una comparación de los términos $(\tilde{\mathcal{H}}_K + \tilde{\mathcal{H}}_p)$ con los términos $(\tilde{\mathcal{H}}_H + \tilde{\mathcal{H}}_F)$; la suma de los cuatro términos corresponde al gran potencial $\tilde{\Omega}$, que se muestra en la columna derecha de la misma figura, y en el lado BEC es de esperar que la suma sea aproximadamente cero. Cómo se ha mostrado en las figuras anteriores, (6.12) y (6.13), la suma de los términos de Hartree-Fock es en general negativa mientras que la suma de los términos $(\tilde{\mathcal{H}}_K + \tilde{\mathcal{H}}_p)$ es negativa en el lado BCS y positiva en el lado BEC. Con el fin de poder comparar ambos términos, en la figura (6.14) columna izquierda, se muestra el negativo del término $(\tilde{\mathcal{H}}_K + \tilde{\mathcal{H}}_p)$ con el término $(\tilde{\mathcal{H}}_H + \tilde{\mathcal{H}}_F)$, de esta manera lo que se espera es que ambas curvas coincidan en el lado BEC para que la presión sea cero. Tal como se ha comentando, esto no se logra con los resultados obtenidos y en esta gráfica se puede notar con mejor detalle la discrepancia de ambas curvas en el lado BEC, excepto para el potencial de Yukawa, que es el único potencial para el cual la presión no se hace negativa. Debido a la diferencia de signo de cada uno de los términos del gran potencial no es posible determinar con precisión si alguno de ellos debe el hecho que la presión sea negativa, sin embargo las gráficas presentadas aquí podrían ayudar en trabajos posteriores interesados en el comportamiento de la energía de Hartree-Fock en un gas de Fermi. Con el modelo presentado aquí de interacción entre fermiones así como el método numérico empleado en este trabajo la presión presenta inconsistencias al incluir la energía de Hartree-Fock y por lo tanto los resultados que se presentan en adelante los términos de Hartree-Fock son omitidos.

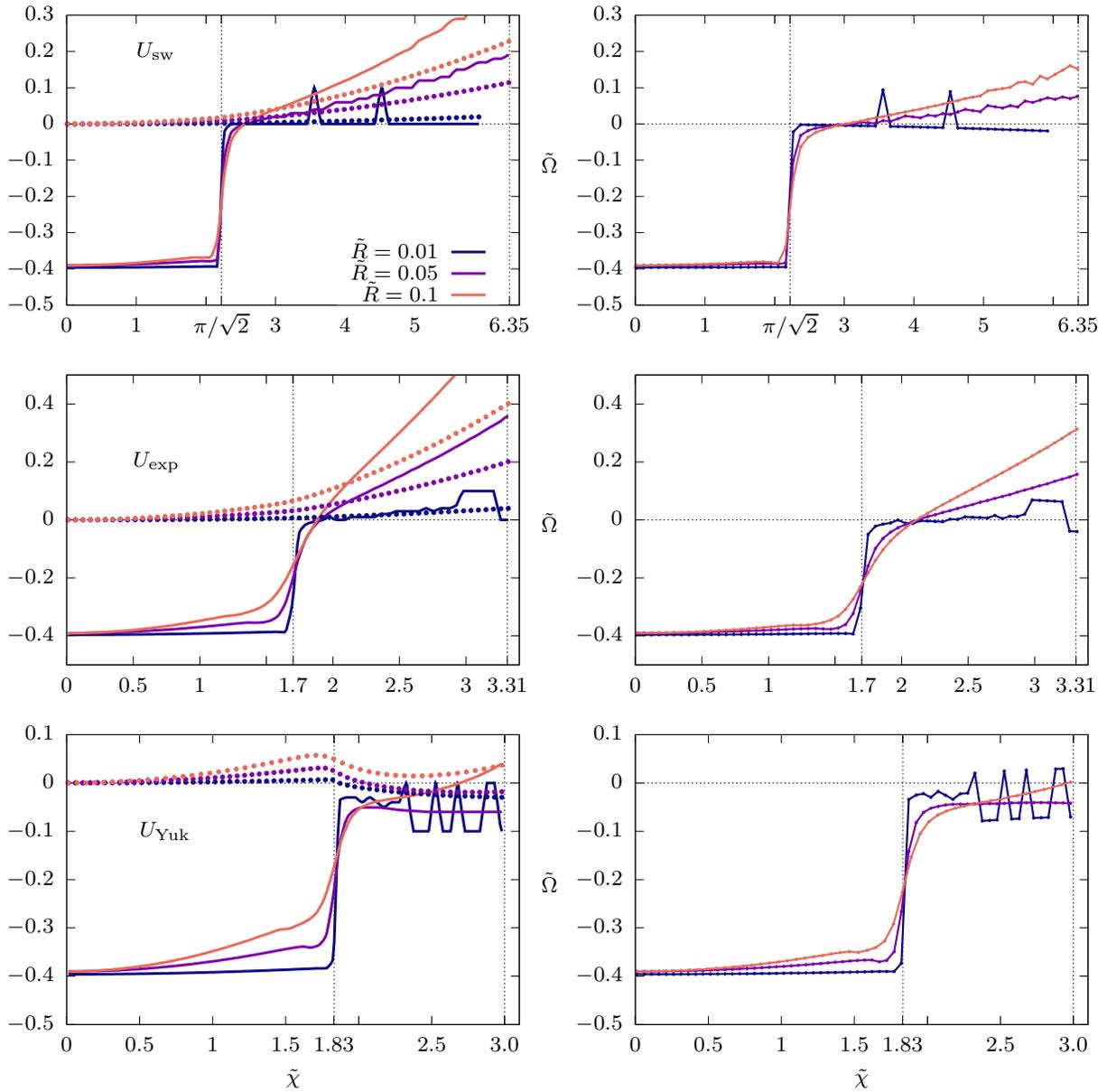


Figura 6.14: En las gráficas de la columna izquierda las líneas continuas corresponde a la suma de los términos: $\tilde{\mathcal{H}}_K + \tilde{\mathcal{H}}_p$, y las líneas punteadas corresponde la suma de los términos de Hartree-Fock, con signo negativo: $-(\tilde{\mathcal{H}}_H + \tilde{\mathcal{H}}_F)$. En la columna derecha, las gráficas corresponden a la suma de los cuatro términos, es decir al gran potencial: $\tilde{\Omega} = \tilde{\mathcal{H}}_K + \tilde{\mathcal{H}}_p + \tilde{\mathcal{H}}_H + \tilde{\mathcal{H}}_F$ (negativo de la presión: $\tilde{p}/3\pi^2 = -\tilde{\Omega}$).

6.5. Estructura del gap $\tilde{\Delta}(k)$.

A diferencia del modelo del crossover con un potencial de contacto donde el gap es constante $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$ (independiente de k), el modelo presentado aquí, con un potencial de interacción finito, el gap depende del momento k y esta dependencia se obtiene al resolver el sistema (6.7), las siguientes figuras muestran las curvas del gap obtenidas para los diferentes potenciales de interacción.

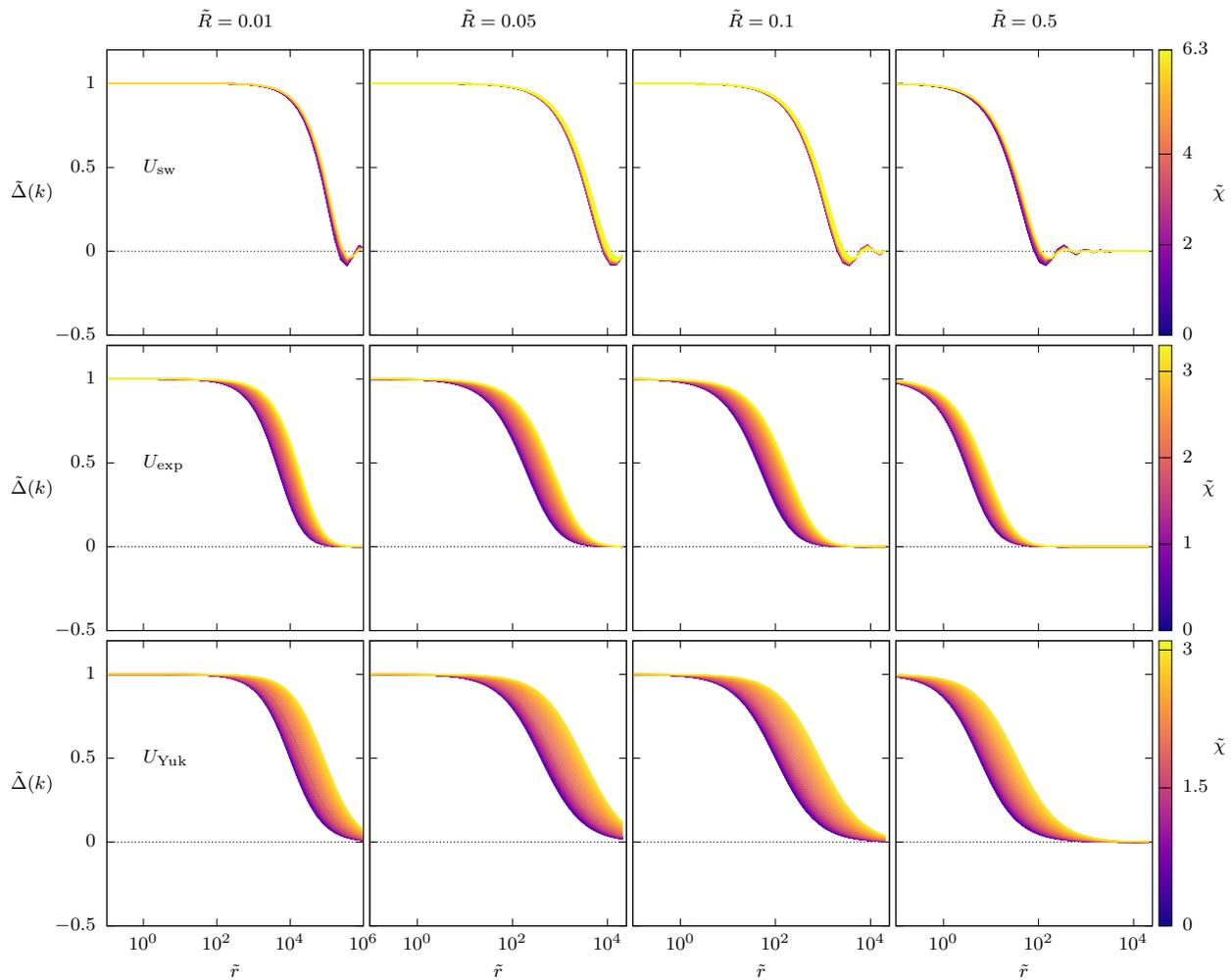
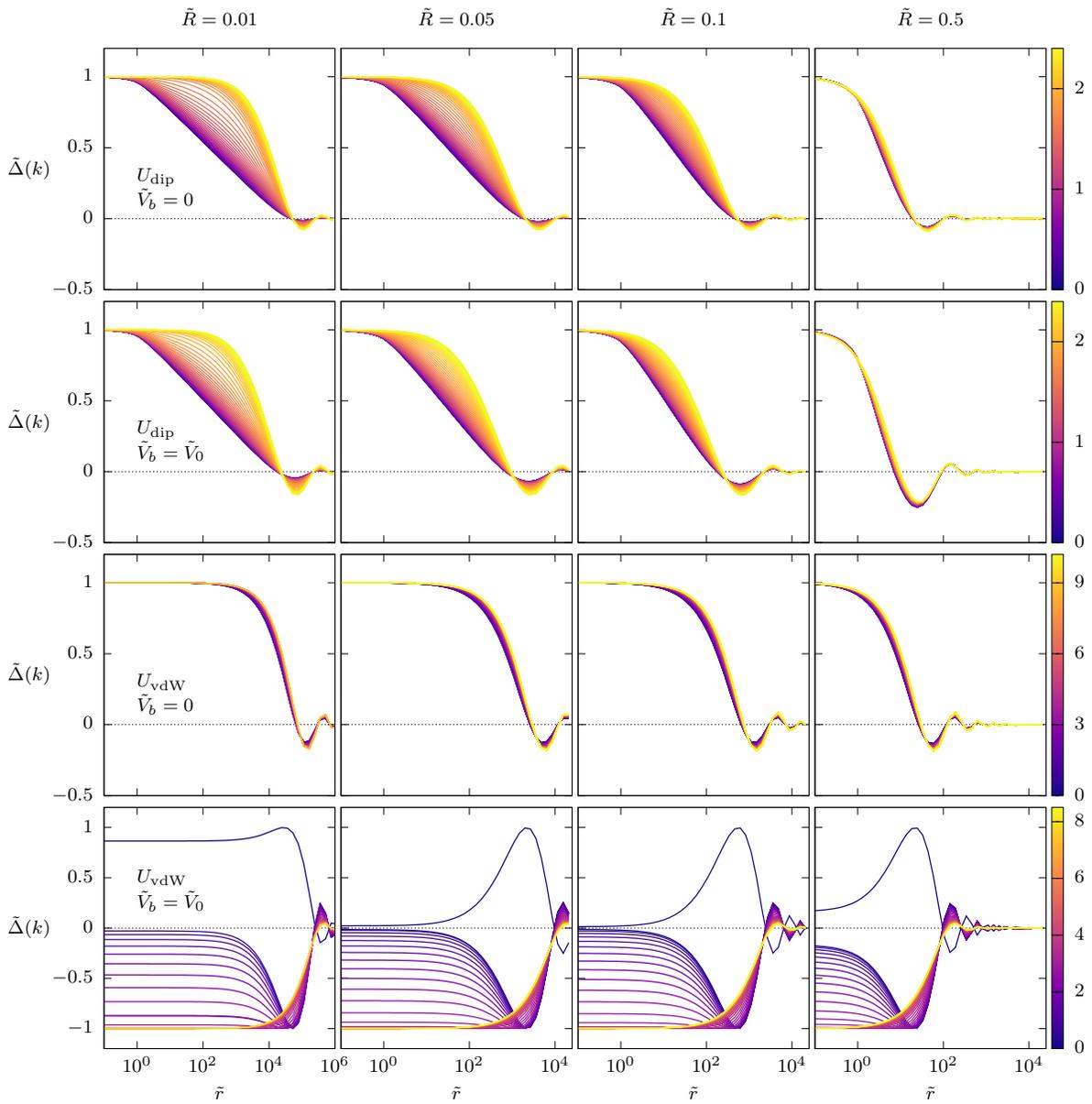


Figura 6.15: Gráficas del gap: $\tilde{\Delta}(k)$, para los potenciales atractivos, pozo de potencial, exponencial y de Yukawa con los diferentes alcances: $\tilde{R} = 0.01, 0.05, 0.5, 0.1$; las gráficas están parametrizadas en escala de colores con la variable $\tilde{\chi}$; las curvas del gap están normalizadas al valor máximo: Δ_{max} , para cada valor de $\tilde{\chi}$, ver figura (6.11)

Figura 6.16: Comportamiento del gap $\tilde{\Delta}(k)$.

6.6. Variable de contacto, potencial de interacción finito.

La variable de contacto \mathcal{C} ha sido definida al inicio del capítulo desde un punto de vista de la termodinámica como la variable conjugada del inverso de la longitud de dispersión η , sin embargo ésta es la misma variable que Shina Tan introdujo en 2008 en una serie de artículos donde analiza las correlaciones en un gas de Fermi [Tan, 2008c] y que han sido muy relevantes en la discusión y entendimiento del fenómeno del crossover. En el siguiente artículo de 2011 [Romero-Rochín, 2011] se puede consultar una discusión más a fondo sobre la identificación de la variable de contacto, definida por Shina Tan, con la variable conjugada de $\tilde{\eta}$, aquí asumiremos tal igualdad entre la variable de contacto y la variable conjugada de $\tilde{\eta}$, excepto un factor constante que se muestra a continuación.

De acuerdo a la definición de la variable de contacto C , S. Tan [Tan, 2008c], en el mismo trabajo se llega a la *relación adiabática*:

$$C = -\frac{4\pi m}{\hbar^2 V} \left[\frac{\partial E}{\partial (1/a)} \right]_{S,V,N}. \quad (6.26)$$

comparando esta expresión con la definición termodinámica de la variable de contacto dada por la ecuación (6.5) se obtiene la siguiente relación entre ambas definiciones: $\mathcal{C} = \hbar^2 V / 4\pi m C$, notar que las dimensiones de \mathcal{C} son de energía multiplicada por longitud y las de C son L^{-4} . La relación (6.26) en unidades de Fermi se expresa de la siguiente manera:

$$\tilde{C} = -\frac{2}{3\pi N} \frac{\partial \tilde{\Omega}}{\partial \tilde{\eta}}. \quad (6.27)$$

por lo tanto:

$$\tilde{C} = \frac{2}{3\pi N} \tilde{\mathcal{C}}, \quad (6.28)$$

de manera que el contacto \tilde{C} representa la variable conjugada de $\tilde{\eta}$ por partícula.

Variable de contacto, potencial de contacto.

En el modelo de interacción entre partículas a través del potencial de contacto (sección 5.4), si designamos: $\tilde{\eta} = 1/\tilde{a}$ en la ecuación (5.72), entonces el gran potencial esta dado por:

$$\tilde{\Omega}(T, V, \mu) = -2\tilde{T} \sum_{\mathbf{k}} \ln \{1 + e^{-\beta \epsilon_{\mathbf{k}}}\} + \frac{3}{4} N \int_0^{\infty} \left[\left(x - \tilde{\mu} - \tilde{E} + \frac{\tilde{\Delta}^2}{2x} \right) \sqrt{x} dx - \frac{3\pi N}{8} \tilde{\Delta}^2 \tilde{\eta} \right] \quad (6.29)$$

derivando se obtiene directamente la expresión del contacto $\tilde{\mathcal{C}} = 3\pi N \tilde{\Delta}^2/8$, por lo tanto en la aproximación de interacción con un potencial de contacto se obtiene:

$$\tilde{\mathcal{C}} = \frac{3\pi N}{8} \tilde{\Delta}^2 \quad \Rightarrow \quad \tilde{\mathcal{C}} = \frac{\tilde{\Delta}^2}{4} \quad (6.30)$$

Variable de contacto, potencial finito.

Se ha mostrado que si las partículas interactúan a través de un potencial finito $U(r)$ con parámetros V_0, R , el gran potencial es función de dichos parámetros: $\Omega [T, V, \mu, U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(R, V_0)]$, a través de la transformada de Fourier del potencial $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(R, V_0)$, por lo tanto, suponiendo que se tiene una relación de la longitud de dispersión con los parámetros del potencial: $a = a(V_0, R)$, entonces el gran potencial tiene una dependencia implícita con la longitud de dispersión.

Entonces, de acuerdo a la definición termodinámica de la variable de contacto: $\mathcal{C} = -(\partial\Omega/\partial\eta)$, es necesario emplear regla de la cadena para calcular la variable de contacto suponiendo un potencial de interacción finito, si consideramos un alcance R constante entonces:

$$\mathcal{C} = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial V_0} \cdot \frac{\partial V_0}{\partial\eta}\right) = -\left(\frac{\partial\Omega}{U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} \cdot \frac{\partial U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{\partial V_0}\right) \left(\frac{\partial V_0}{\partial\eta}\right), \quad (6.31)$$

con esta expresión, en principio, es posible calcular la variable de contacto para un potencial de interacción $U(r)$. En la practica esta expresión presenta varias dificultades al hacer los cálculos, por ejemplo, solo para los potenciales de interacción exponencial y pozo de potencial se cuentan con expresiones de la longitud de dispersión en función de los parámetros del potencial: $a(R, V_0)$, ver ecuación (6.24), y por lo tanto es posible calcular explícitamente la derivada: $\partial V_0/\partial\eta$, en los demás casos sería necesario calcular numéricamente esta derivada. Aquí solo se presenta el calculo de la variable de contacto para el potencial estos dos potenciales: exponencial y el pozo en el estado base (temperatura cero). Para realizar el calculo del contacto (6.31) se considera la siguiente expresión del gran potencial, ver ecuación (A.66) del apéndice A (sin los términos de Hartree-Fock):

$$\Omega = \mathcal{H}_K + \mathcal{H}_p, \quad \text{donde: } \mathcal{H}_p = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}, \quad (6.32)$$

y $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ son los parámetros de la transformación de Bogoliubov-Valatin. El primer término $\hat{\mathcal{H}}_K$ no depende de potencial y para el caso del pozo de potencial y potencial exponencial la transformada de Fourier es proporcional al alcance V_0 , es decir: $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \propto V_0$, ver ecuación (6.9), de donde se obtiene:

$$\frac{\partial\Omega}{\partial V_0} = \frac{1}{V_0} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \quad (6.33)$$

por lo tanto la variable de contacto se puede expresar de la siguiente manera:

$$\mathcal{C} = -\mathcal{H}_p \lambda \quad (6.34)$$

donde se ha definido el siguiente factor: $\lambda \equiv 1/V_0 \cdot (\partial V_0 / \partial \eta)$, que solo depende de las propiedades del potencial de interacción y se puede expresar de las siguientes formas equivalentes:

$$\lambda \equiv \frac{1}{V_0} \left(\frac{\partial V_0}{\partial \eta} \right) = -\frac{2a^2}{z} \frac{1}{\partial a / \partial z} = -\frac{2}{z} \frac{1}{\eta^2} \frac{1}{\partial a / \partial z} \quad (6.35)$$

donde: $z = R \sqrt{2m_r V_0 / \hbar^2}$, ver expresiones (4.74) y (4.83) de la longitud de dispersión del pozo de potencial y exponencial, respectivamente.

De esta forma, la variable de contacto en el caso del potencial finito es proporcional al término de pares $\hat{\mathcal{H}}_p$ y al factor λ que solo depende de las propiedades del potencial de interacción $U(r)$. En unidades de Fermi:

$$\tilde{\mathcal{C}} = -\tilde{\mathcal{H}}_p \tilde{\lambda}(\tilde{\chi}), \quad \text{donde: } \tilde{\lambda}(\tilde{\chi}) = -\frac{2\tilde{a}^2}{\tilde{\chi}} \frac{1}{\partial \tilde{a} / \partial \tilde{\chi}}, \quad (6.36)$$

donde $\tilde{\chi} = \tilde{R} \sqrt{\tilde{V}_0}$, la ecuación (6.24) contiene las expresiones $\tilde{a} = \tilde{a}(\tilde{\chi})$ para los el pozo de potencial y exponencial a partir de las cuales se obtienen las siguientes derivadas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{a}_{\text{sw}}}{\partial \tilde{\chi}} &= -\tilde{R} \left\{ \frac{\tilde{\chi} [1 + \tan^2(\tilde{\chi}/\sqrt{2})] - \sqrt{2} \tan(\tilde{\chi}/\sqrt{2})}{\tilde{\chi}^2} \right\}. \\ \frac{\partial \tilde{a}_{\text{exp}}}{\partial \tilde{\chi}} &= -2\tilde{R} \left\{ \frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{N_0(\sqrt{2}\tilde{\chi}) J_1(\sqrt{2}\tilde{\chi}) - N_1(\sqrt{2}\tilde{\chi}) J_0(\sqrt{2}\tilde{\chi})}{[J_0(\sqrt{2}\tilde{\chi})]^2} - \frac{1}{\tilde{\chi}} \right\}. \end{aligned} \quad (6.37)$$

En la figura 6.17 se muestra el comportamiento del factor $\tilde{\lambda}(\tilde{\chi})$ para los dos potenciales de interacción, se puede observar que $\tilde{\lambda}$ es cero en los extremos del intervalo de $\tilde{\chi}$, que corresponde a los límites: $\tilde{\eta} \rightarrow \pm\infty$ ($\tilde{a} = 0$), alcanza un valor máximo y varia de manera continua en todo el intervalo de $\tilde{\chi}$. Por otra parte, en la figura 6.18 se presenta a la variable de contacto $\tilde{\mathcal{C}}$ en función de la variable $\tilde{\eta}$ y $\tilde{\chi}$ para ambos potenciales, en la variable $\tilde{\chi}$ el comportamiento aunque es parecido al del factor $\tilde{\lambda}$ cabe resaltar que el contacto tienen un crecimiento justo en el valor de $\tilde{\chi}$ tal que la longitud de dispersión es cero tal como sucede con modelo de interacción con un potencial de contacto, esto se puede notar de mejor manera en la misma figura, columna izquierda. Finalmente en la figura 6.19 se comparan los resultados de la variable de contacto para ambos potenciales de interacción (alcances: $\tilde{R} = 0.01, 0.05$) con el modelo de interacción de potencial de contacto, en el intervalo de $\tilde{\eta}$ mostrado en la gráfica los resultados muy similares.

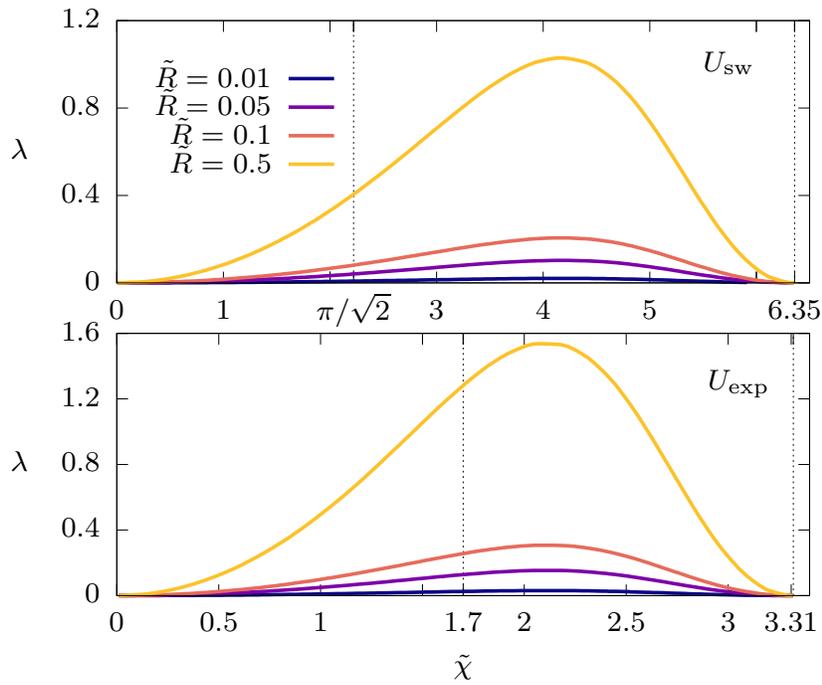


Figura 6.17: Gráfica del factor $\tilde{\lambda}(\tilde{\chi})$ para el pozo de potencial y potencial exponencial para cuatro alcances.

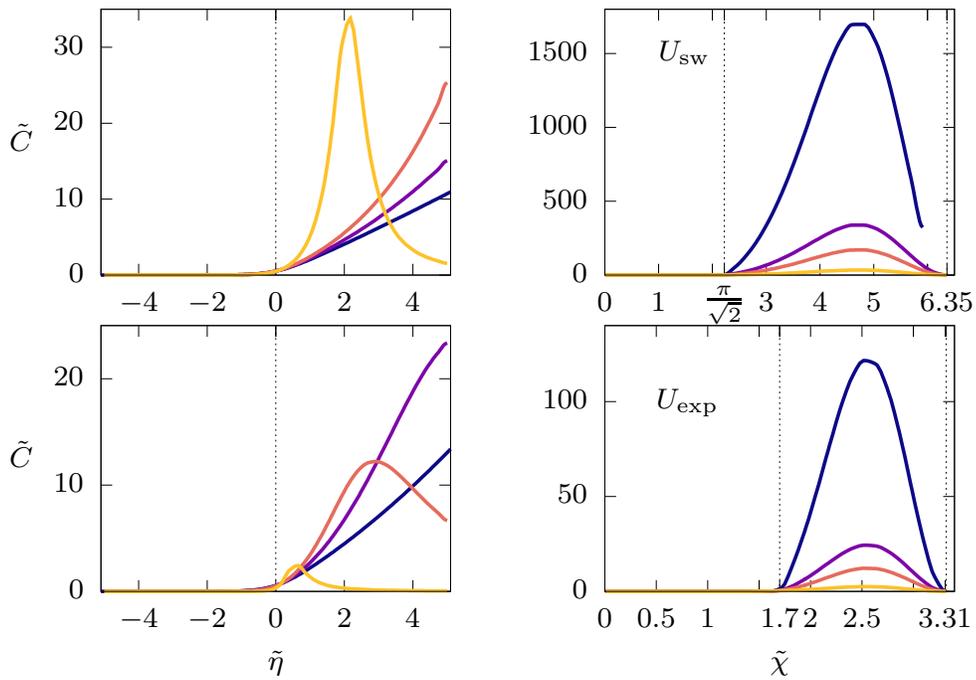


Figura 6.18: Comportamiento de la variable de contacto \tilde{C} como función de $\tilde{\eta}$ y $\tilde{\chi}$ para el pozo de potencial y potencial exponencial para cuatro alcances con los cuatro alcances.

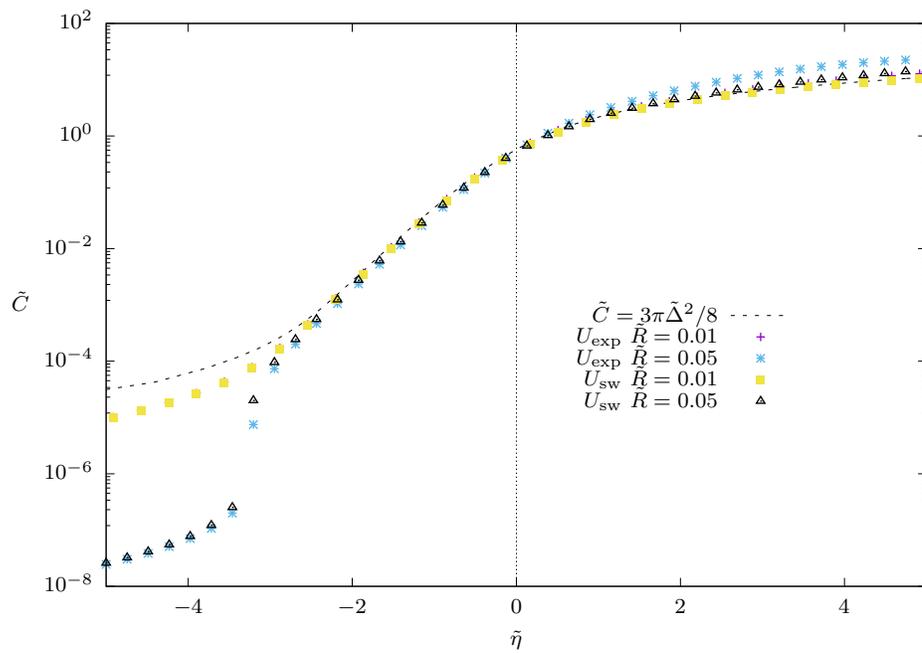


Figura 6.19: Comparación de la variable de contacto \tilde{C} (escala logarítmica.) para ambos potenciales de interacción con el resultado del modelo de potencial de contacto. .

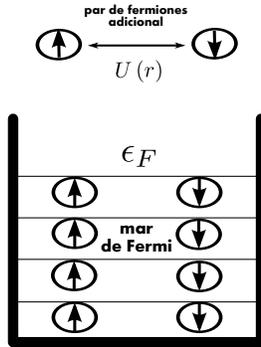
Funciones de pares.

Continuación se hace un análisis de los estados de pares (pares de Cooper) en el gas de Fermi, se describe al par de Cooper como un estado ligado formado por pares de partículas cuyos estados son cercanos a la superficie de Fermi, este estado ligado está relacionado con el principio de Pauli. Dos propiedades a destacar de los pares de Cooper en este trabajo son, por una parte que su energía de enlace es muy débil (es exponencial con la interacción) y además que su función de onda decae algebraicamente. Los estados de pares o pares de Cooper, compuesto por pares de partículas en estados de espín opuesto, es la idea básica del comportamiento microscópico en un sistema de fermiones de la teoría BCS propuesto en 1957 por Bardeen-Cooper-Schieffer [Bardeen et al., 1957] para explicar la superconductividad convencional. En este trabajo se presenta el calculo de las funciones de onda de los pares de Cooper para el gas de Fermi modelando la interacción con los diferentes potenciales mencionado en los capítulos previos. Estas funciones de pares quedan determinadas, en general, por los parámetros $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ definidos por la transformación de Bogoliubov-Valatin y en este capítulo se presentan los resultados obtenidos al variar los parámetros del potencial \tilde{R} , \tilde{V}_0 .

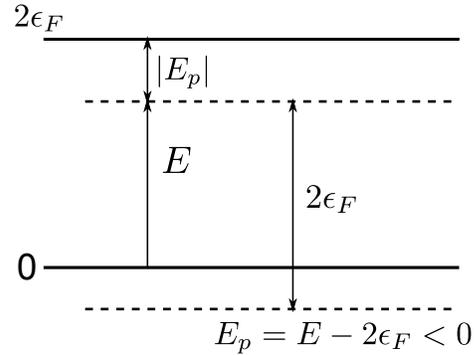
7.1. Pares de Cooper.

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

las propiedades de un par de Cooper difieren notablemente de las de una molécula.



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



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

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

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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2 + U(r)\right)\psi_p(\mathbf{r}) = -|E_p|\psi_p(\mathbf{r}), \quad (7.1)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{m}(i\mathbf{q})^2\tilde{\psi}_p(\mathbf{q}) + \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}'}\tilde{U}(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\tilde{\psi}_p(\mathbf{q}') = -|E_p|\tilde{\psi}_p(\mathbf{q}), \quad (7.2)$$

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

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\mathbf{q}) &= \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}), \\ f(r) &= \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tilde{f}(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (7.3)$$

En estas definiciones se está considerando que los estados en \mathbf{q} representan un conjunto discreto, tal como sucede con una partícula ligada. Entonces, introduciendo la completitud de estos estados y tomando el límite termodinámico: $\sum \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{q}$, la ecuación (7.2) se transforma en:

$$\tilde{\psi}_p(\mathbf{q}) = \frac{1}{-q^2 \frac{\hbar^2}{m} - |E_p|} \int \frac{d^3 \mathbf{q}'}{(2\pi)^3} \tilde{U}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \tilde{\psi}_p(\mathbf{q}'). \quad (7.4)$$

Esta ecuación contiene dos incógnitas: la función del par de Cooper: $\tilde{\psi}_p(\mathbf{q})$, y su energía: E_p . Para eliminar la dependencia con la función $\tilde{\psi}_p(\mathbf{q})$ lo que se suele hacer es aproximar la transformada de Fourier del potencial $\tilde{U}(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ por una constante U_0 que puede salir de la integral. De esta manera, integrando nuevamente sobre la coordenada \mathbf{q} en ambos lados de la ecuación y dividiendo por el factor común: $\int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}_p(\mathbf{q})$, se obtiene la siguiente ecuación para la energía E_p :

$$-\frac{1}{U_0} = \int_{\Gamma} \frac{d^3 \mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2 \frac{\hbar^2}{m} + |E_p|}. \quad (7.5)$$

La presencia del mar de Fermi se introduce en la región de integración Γ , de la siguiente manera: si \mathbf{q}_1 y \mathbf{q}_2 representa al momento de los dos fermiones que componen al par, entonces debido al principio de Pauli: $|\mathbf{q}_1|, |\mathbf{q}_2| > k_F$ (donde k_F es el momento de Fermi); por otra parte, el momento de centro de masa y relativo se definen como (partículas de igual masa):

$$\begin{aligned} \vec{Q} &= \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, & \text{momento del centro de masa;} \\ \mathbf{q} &= \frac{\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2}{2}, & \text{momento relativo.} \end{aligned} \quad (7.6)$$

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

$$\Gamma \equiv \left| \frac{\vec{Q}}{2} \pm \mathbf{q} \right| > k_F, \quad (7.7)$$

que depende del momento del centro de masa reduciendo la región de integración. Se puede demostrar que el valor de la energía E_p alcanza su valor máximo cuando el momento del centro de masa es nulo $\vec{Q} = 0$ [Alexander L. Fetter, 1971], en adelante consideraremos este caso.

La ecuación (7.5) escrita en términos de la energía es la siguiente¹:

$$-\frac{1}{U_0} = \frac{1}{V} \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \epsilon_c} \frac{g(\epsilon) d\epsilon}{2(\epsilon - \epsilon_F) + |E_p|}, \quad (7.8)$$

donde $g(\epsilon)$ es la densidad de estados y ϵ_c corresponde a una *energía de corte* necesaria para que la integral converja². En el contexto de la superconductividad la interacción atractiva entre los electrones es resultado de su interacción con los fonones de la red, esta interacción ocurre dentro

¹Midiendo respecto de la energía de Fermi: $\frac{\hbar^2 q^2}{m} = 2 \frac{\hbar^2 q^2}{2m} = 2\epsilon, \Rightarrow \frac{\hbar^2 q^2}{m} = 2(\epsilon - \epsilon_F)$.

²Esta limitación en la energía esta relacionada con la aproximación que se hizo de la transformada de Fourier del potencial por una constante: $\tilde{U}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \approx \tilde{U}_0$.

de un pequeño intervalo de energías alrededor de la energía de Debye: $|\epsilon - \epsilon_F| < \hbar\omega_D$, donde ω_D corresponde a la frecuencia de Debye. En este caso [Cooper, 1956]: $\tilde{U}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') = -|U_0|$, y la solución para la energía del par de Cooper es el siguiente:

$$E_p = -2\hbar\omega_D e^{-2V/g(\epsilon_F)|U_0|}. \quad (7.9)$$

En este caso la energía del par decae exponencialmente con la interacción: $|\tilde{U}_0|$; es importante notar que aún cuando la interacción sea débil existe un valor finito para la energía E_p , además es posible verificar la necesidad del mar de Fermi para la aparición del estado ligado.

Por otro lado, en el contexto de los gases de Fermi a muy bajas temperaturas lo usual es emplear un potencial de contacto con el método de renormalización descrito en la sección 4.5, en este caso se tiene la relación entre U_0 y la longitud de dispersión:

$$\frac{1}{U_0} \approx \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\vec{k}}}, \quad (7.10)$$

y la ecuación 7.8 queda de la siguiente manera:

$$-\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} \approx \frac{1}{V} \int_{\epsilon_F}^{\infty} \frac{g(\epsilon)}{2(\epsilon - \epsilon_F) + |E_p|} d\epsilon - \frac{1}{V} \int_0^{\infty} \frac{g(\epsilon)}{2\epsilon}, \quad (7.11)$$

donde la energía de corte ϵ_c se ha tomado como infinita: $\epsilon_c \rightarrow \infty$, aquí no es posible restringir el rango de interacción entre los fermiones. Esta ecuación tiene una forma similar a la ecuación del gap y para resolver se puede considerar la densidad de estados para un gas homogéneo de partícula libre: $g(\epsilon) = \frac{2\pi V(2m)^{2/3}}{\hbar^3} \epsilon^{1/2}$, suponiendo además que: $\epsilon_F \gg E_p$ y la longitud de dispersión es negativa: $|a| = -a$, entonces la energía del par de Cooper en un gas de Fermi está dada por [Ketterle and Zwerlein, 2008]:

$$E_p = -\frac{8}{e^2} \epsilon_F e^{-\pi/k_F |a|}. \quad (7.12)$$

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

$$\psi_p(r) \sim 1/r, \quad (7.13)$$

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

La formación de este estado es consecuencia del mar de Fermi que limita la ocupación de estados en el espacio \mathbf{k} debido al principio de Pauli. Debido a la “*extensión*” de los pares de Cooper el estado de un gas de fermiones que interactúan atractivamente corresponde a la superposición de todos los pares de Cooper posibles; es decir, cada fermión en el estado $|\mathbf{k}, \uparrow\rangle$ esta “*apareado*” con todos y cada uno de los fermiones que se encuentran en el estado $|\mathbf{-k}, \downarrow\rangle$. Tal este estado del sistema es conocido como *estado BCS* y en la siguiente sección se hace una breve revisión.

7.2. Estado BCS.

La teoría BCS, desarrollada en 1957, explica el fenómeno de la superconductividad convencional, descubierta Kamerling Onnes al realizar mediciones experimentales en la resistencia del mercurio a temperaturas por debajo de los 4 K. La idea general de la teoría BCS, presentada por Bardeen-Cooper-Schliefer, consiste en la formación de estados de pares (*pares de Cooper*) entre electrones (fermiones) que se mueven libremente en la red cristalina del metal lo que provoca la nula resistencia eléctrica en un material. La teoría BCS tiene un carácter más general y ha sido empleada para estudiar diversos sistemas fermiónicos con interacción: gases de Fermi, redes ópticas, etc. y en el contexto de este trabajo el fenómeno del crossover tiene como fundamento la teoría BCS. Una de las ideas fundamentales de la teoría BCS es la función de onda BCS que describe el estado base (temperatura cero) de un sistema de fermiones que forman pares y se expresa de la siguiente manera:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) |0\rangle, \quad (7.14)$$

donde $|0\rangle$ representa al vacío, además se define el operador: $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \equiv \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{-k}\downarrow}^{\dagger}$ y los parámetros $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ se determinan al minimizar la energía del sistema. Como se ha dicho en la sección anterior, la energía de los pares es negativa respecto de la energía de Fermi por lo que el estado más estable y de menor energía en un sistema de fermiones es tal que todos los fermiones forman pares de Cooper, lo que conduce al uso del principio variacional en la energía del sistema para determinar los parámetros $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$. De manera alternativa, estos parámetros se pueden determinar a través de una transformación de Bogoliubov-Valantin que diagonaliza el hamiltoniano del sistema de fermiones tal como se discute en el capítulo A. La importancia de estos parámetros consiste en que determinan, por una parte la termodinámica del gas de Fermi (capítulo 6), pero además, como veremos a continuación también determinan las funciones de pares $\psi_p(r)$.

Consideremos la función de onda de un par de fermiones tal que la parte espacial solo depende de la distancia relativa: $\varphi(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2) = \varphi(\vec{\mathbf{r}}_{12})$, supondremos además que ambas partículas del par tienen espín opuestos (\uparrow, \downarrow) y por lo tanto la parte espinorial en la función del par tiene estructura singlete ($S = 0$) de manera que el estado del par se expresa de la siguiente manera:

$$\varphi_p(\vec{\mathbf{r}}_1, \sigma_1; \vec{\mathbf{r}}_1, \sigma_1) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow_1 \downarrow_2 - \downarrow_1 \uparrow_2) \varphi(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2). \quad (7.15)$$

Haciendo uso de los estados de partícula libre (ondas planas): $\vec{\mathbf{k}}: \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}/\sqrt{V}$, la parte espacial del par, $\varphi(\vec{\mathbf{r}}_{12})$, se puede desarrollar en esta base (desarrollo de Fourier):

$$\varphi(\vec{\mathbf{r}}_{12}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{\mathbf{r}}_{12}}, \quad (7.16)$$

donde $\tilde{\varphi}(\mathbf{k})$ corresponde a la transformada de Fourier de la parte espacial del estado del par $\varphi(\vec{\mathbf{r}}_{12})$:

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{k}) = \int d^3r_{12} \varphi(\vec{\mathbf{r}}_{12}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{\mathbf{r}}_{12}} \quad (7.17)$$

de tal manera la función del par se puede escribir como:

$$\varphi_p(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow_1 \downarrow_2 - \downarrow_1 \uparrow_2) \tilde{\varphi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2)}, \quad (7.18)$$

como esta función de pares es la representación en el espacio de coordenadas del estado: $|\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow\rangle$, entonces³:

$$\varphi_p(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_1) = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}(\mathbf{k}) \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\langle \mathbf{r}_1 | \mathbf{k} \uparrow \rangle \langle \mathbf{r}_2 | -\mathbf{k} \downarrow \rangle - \langle \mathbf{r}_1 | -\mathbf{k} \downarrow \rangle \langle \mathbf{r}_2 | \mathbf{k} \uparrow \rangle \right], \quad (7.19)$$

donde, haciendo uso de las propiedades de los operadores de Fermi $\{\hat{a}_{\pm\mathbf{k}\sigma}, \hat{a}_{\pm\mathbf{k}\sigma}^\dagger\}$, la función de pares se puede escribir de la siguiente manera:

$$\varphi_p(\vec{\mathbf{r}}_1, \vec{\mathbf{r}}_1) = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}(\mathbf{k}) \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | 0 \rangle, \quad (7.20)$$

(suponiendo $\tilde{\varphi}(\mathbf{k}) = \tilde{\varphi}(-\mathbf{k})$) se puede verificar que la función de ondas del par es antisimétrica, $\vec{\mathbf{r}}_1 \sigma_1 \rightleftharpoons \vec{\mathbf{r}}_2 \sigma_2$, por lo tanto el estado de un par de fermiones con espines y vectores de onda opuestos se expresa como:

$$|\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow\rangle = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\varphi}(\mathbf{k}) \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | 0 \rangle, \quad (7.21)$$

el estado de $N/2$ pares (con N fermiones) se puede escribir empleando los operadores $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger$:

$$|\Phi\rangle_N = \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{N/2}} \tilde{\varphi}(\mathbf{k}_1) \cdots \tilde{\varphi}(\mathbf{k}_{N/2}) \hat{\beta}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \cdots \hat{\beta}_{\mathbf{k}_{N/2}}^\dagger | 0 \rangle, \quad (7.22)$$

³ $\varphi_p(\vec{\mathbf{r}}_1, \sigma_1; \vec{\mathbf{r}}_1, \sigma_1) = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow \rangle$

se puede demostrar que este estado de $N/2$ pares es antisimétrico en los fermiones individuales (los estados de pares también son antisimétricos), pero aún más importante, este estado representa la función de onda de $N/2$ pares todos en el mismo estado φ_p por lo que $|\Phi\rangle_N$ se puede considerar como la función de onda de un “condensado” de pares⁴.

El problema consiste en determinar la función $\tilde{\varphi}(\mathbf{k})$ tal que minimice la energía del sistema y a partir de esta función se puede encontrar el estado de pares en el espacio de coordenadas $\varphi(\vec{\mathbf{r}}_{12})$. La restricción de fijar el número de partículas N impide en la practica aplicar de manera directa el principio variacional para calcular la función $\tilde{\varphi}(\mathbf{k})$. Sin embargo, esta restricción se puede relajar cambiando de representación al ensamble gran canónico, tal como lo hiciera Schieffer en 1957 [Bardeen et al., 1957]. Así, el estado BCS que representa la superposición de un par, dos pares, etc. hasta $N/2$ pares se expresa como:

$$|\Psi\rangle_{BCS} = \mathcal{N} \sum_N |\Phi\rangle_N = \mathcal{N} \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + \tilde{\varphi}(\mathbf{k}) \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger\right) |0\rangle, \quad (7.23)$$

donde \mathcal{N} es un factor de normalización, lo más común es escribir el estado BCS normalizado y empleando los parámetros $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ de la siguiente manera:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger\right) |0\rangle, \quad (7.24)$$

(la condición de normalización del estado BCS esta determinado por la relación $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$) se puede mostrar que la relación entre la transformada de Fourier de la función de pares y los parámetros variacionales $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ esta dada por:

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{k}) = \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}. \quad (7.25)$$

Los parámetros $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ se determinan a través de minimizar la energía (en el gran canónico): ${}_{BCS} \langle \Psi | \hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N} | \Psi \rangle_{BCS}$ o a través de una transformación de Bogoliubov-Valantin⁵ tal como se presenta en este trabajo.

7.3. Función de pares, crossover.

Los estados de pares $\varphi_p(r)$ en el espacio de coordenadas esta determinada por el siguiente desarrollo de Fourier:

⁴Es interesante notar que el estado base de un gas ideal de N fermiones (sin interacción), tal que hay $N/2$ fermiones en cada estado de espín posible $\{\uparrow, \downarrow\}$ se recupera cuando: $\tilde{\varphi}(\mathbf{k}) = \theta(k_F - |\mathbf{k}|)$; sin embargo, en este caso la función de pares en el espacio real, $\varphi(\vec{\mathbf{r}}) = \int_{k < k_F} d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{\mathbf{r}}}$, queda expresada de la siguiente forma: $\varphi(\vec{\mathbf{r}}) = \frac{1}{r^3} [\text{sen}(k_F r) - k_F r \cos(k_F r)]$ en cuyo caso se puede verificar que el valor medio $\langle \varphi(\vec{\mathbf{r}}) | r^2 | \varphi(\vec{\mathbf{r}}) \rangle$ diverge.

⁵En este sentido, es importante diferenciar los pares de fermiones de las cuasipartículas que se identifican en el capítulo 5 al diagonalizar el hamiltoniano del gas de Fermi con interacción, se puede verificar que el estado BCS es un estado de cero cuasipartículas: $\hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}} |\Psi_{BCS}\rangle = 0$.

$$\varphi(r) = \frac{1}{V} \sum \tilde{\varphi}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{r}} = \frac{1}{V} \sum \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{r}}, \quad (7.26)$$

donde la transformada de Fourier de la función de pares es: $\tilde{\varphi}(\mathbf{k}) = v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}$. A su vez, los parámetros $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ quedan determinados de manera general por las siguientes expresiones⁶, ver ecuación (5.36) del capítulo 5:

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \\ v_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \end{aligned} \quad \text{donde:} \quad \begin{aligned} \mathcal{E}_{\mathbf{k}} &\equiv \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu \\ E_{\mathbf{k}} &\equiv \sqrt{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}. \end{aligned} \quad (7.27)$$

Sin embargo, lo usual es considerar a la función de pares la siguiente expresión [Leggett, 2006], [Ketterle and Zwerlein, 2008]:

$$\psi_p(r) = \frac{1}{V} \sum F_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{r}}, \quad (7.28)$$

donde: $F_{\mathbf{k}} \equiv u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}$, esta definición de las funciones de pares se debe a varias propiedades importantes que tienen las funciones $F_{\mathbf{k}}$. Por ejemplo, se puede demostrar que se satisface la siguiente relación⁷: ${}_{BCS} \langle \Psi | \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} | \Psi \rangle_{BCS} = F_{\mathbf{k}}$, de tal manera que la función de pares $\psi_p(r)$ se puede expresar de la siguiente manera:

$$\psi_p(r) = {}_{BCS} \langle \Psi | \hat{\Psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}_1) \hat{\Psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}_2) | \Psi \rangle_{BCS} = \frac{1}{V} \sum F_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{r}}, \quad (7.29)$$

donde: $\hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{r}}$, son los operadores de campo de Fermi. Además, las funciones $F_{\mathbf{k}}$ corresponden a que los elementos de la matriz densidad de dos partículas (un par de Cooper); es decir, se puede demostrar que la función de correlación de pares:

$$\rho_2(\text{par}) \equiv \langle \hat{\Psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}_1) \hat{\Psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}_2) \hat{\Psi}_{\downarrow}(\vec{r}'_2) \hat{\Psi}_{\uparrow}(\vec{r}'_1) \rangle, \quad (7.30)$$

esta dada por⁸ [Leggett, 2006]:

$$\rho_2(\text{par}) = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}} F_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\vec{r}'} = \psi_p^*(r) \psi_p(r'). \quad (7.31)$$

Finalmente, se puede notar que la energía de pares, ecuación (A.65), esta dada por la siguiente expresión: $\hat{\mathcal{H}}_p = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} F_{\mathbf{k}} F_{\mathbf{k}'}$, que se puede interpretar como la energía de interacción entre dos pares, siendo $F_{\mathbf{k}}$ la transformada de Fourier de la función del par.

⁶En adelante se desprecian la energía de Hartree y de Fock, como se visto en el capítulo anterior estos términos conducen a valores de presión negativa y por lo tanto se omiten en el análisis de la funciones de pares.

⁷Se puede demostrar que de manera equivalente: $\langle \Phi_{N_p-1} | \beta_{\mathbf{k}} | \Phi_{N_p} \rangle = F_{\mathbf{k}}$, donde $|\Phi_{N_p}\rangle$ es la función de N_p pares de Cooper, ver ecuación (7.22).

⁸La función de correlación $\rho_2(\text{par})$ en general contiene suma sobre cuatro incide: $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4$, para el resultado de la ecuación (7.30) solo se considera el caso: $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_4 = -\mathbf{k}_3$, de donde: $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}, \mathbf{k}_4 = \mathbf{k}'$.

Para calcular las funciones de pares $\psi_p(r)$, en el capítulo 5 se mostró la siguiente relación (ecuación 5.39): $u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}}/2E_{\mathbf{k}}$. Sustituyendo en la expresión (7.28) y considerando el límite termodinámico (cuando hay un continuo de estados) se obtiene lo siguiente:

$$\psi_p(r) = \frac{C}{(2\pi)^3} \int \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3k, \quad (7.32)$$

donde C es una constante de normalización⁹. Considerando que el gap $\Delta_{\mathbf{k}}$ y $E_{\mathbf{k}}$ solo dependen de k , la integración en el ángulo sólido se puede efectuar y la integral se reduce a la siguiente expresión:

$$\psi_p(r) = \frac{C}{(2\pi)^2} \frac{1}{r} \int_0^{\infty} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \text{sen}(kr) k dk. \quad (7.33)$$

Cabe recordar que el gap $\Delta_{\mathbf{k}}$ es en general una función del momento k , ver figuras (6.15) , (6.16), y por lo tanto el factor: $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$ también depende de k . A su vez, el potencial químico μ y el gap dependen implícitamente de la longitud de dispersión o de los parámetros del potencial de interacción y por lo tanto las funciones de pares dependen también de estos parámetros. En el caso de un potencial de interacción de contacto el gap es independiente de k ($\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$) y por lo tanto el gap puede salir de la integral. La figura 2.4, capítulo 2, muestra el comportamiento de las funciones de pares para diferentes valores del inverso de la longitud de dispersión η . En unidades de Fermi (ya con el cambio de variable: $x = k^2/k_F^2$) las funciones de pares (7.33) se expresa de la siguiente manera:

$$\tilde{\psi}_p(r) = \frac{C}{(2\pi)^2} \frac{1}{2\tilde{r}} \int_0^{\infty} \frac{\tilde{\Delta}(x)}{\tilde{E}(x)} \text{sen}(\sqrt{x}\tilde{r}) dx. \quad (7.34)$$

En las figuras 7.1 a 7.4 se muestran las funciones de pares para los diferentes potenciales de interacción con los diferentes alcances: $\tilde{R} = 0.01, 0.05, 0.1, 0.5$. Las funciones de pares, ecuación (7.34), están definidas con un factor de normalización que es diferente para cada valor de $\tilde{\chi}$ (o valor de la longitud de dispersión $\tilde{\eta}$) por lo que para propósitos prácticos se gráfica la función de pares normalizada a su valor máximo: $\psi(r)/\psi_{max}(r)$. Como se ha visto en el capítulo anterior hay una correspondencia entre la variable $\tilde{\chi}$ con el inverso de la longitud de dispersión $\tilde{\eta}$ (figuras 6.2 y 6.3). En general, el comportamiento de las funciones de pares con el parámetro $\tilde{\chi}$ es muy claro, para valores menores de $\tilde{\chi}$ la función de onda es predominantemente oscilatoria y de largo alcance, propiedades específicas de un par de Cooper y por lo tanto representa el estado BCS del gas; mientras aumenta el valor de $\tilde{\chi}$ la función de pares disminuye sus oscilaciones hasta que desaparecen y la función de onda se “confina” en un valor cercano al alcance del potencial, en

⁹A diferencia de la función $\varphi_p(r)$, ecuación (7.26), que si esta normalizada, la función $\psi_p(r)$ no esta normalizada.

este caso la función de pares tiene un tamaño finito y representa un estado diatómico de pares de partículas. En las gráficas 7.5 a 7.8 se muestran las mismas funciones de pares pero en este caso el eje vertical corresponde a la variable: $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$ y la escala de color corresponde al valor de la función de pares, que al estar normalizadas a su valor máximo, está en el intervalo acotado: [-1:1]. Estas gráficas permiten apreciar de mejor manera el comportamiento de las funciones de pares en la variable $\tilde{\chi}$ y se puede notar claramente el cambio drástico que sufren las funciones de pares, del estado oscilante y por lo tanto no localizado al estado localizado que no presenta oscilaciones, más aún el cambio en las funciones de pares se presenta en el valor de $\tilde{\chi}$ tal que: $\tilde{\eta} = 0$ ($\tilde{a} = \infty$), diferente para cada potencial de interacción. Este comportamiento de la función de pares es una corroboración más, adicional a la termodinámica, de la idea del crossover en el cual el gas de fermiones pasa de un estado de pares de Cooper a un estado de moléculas diatómicas.

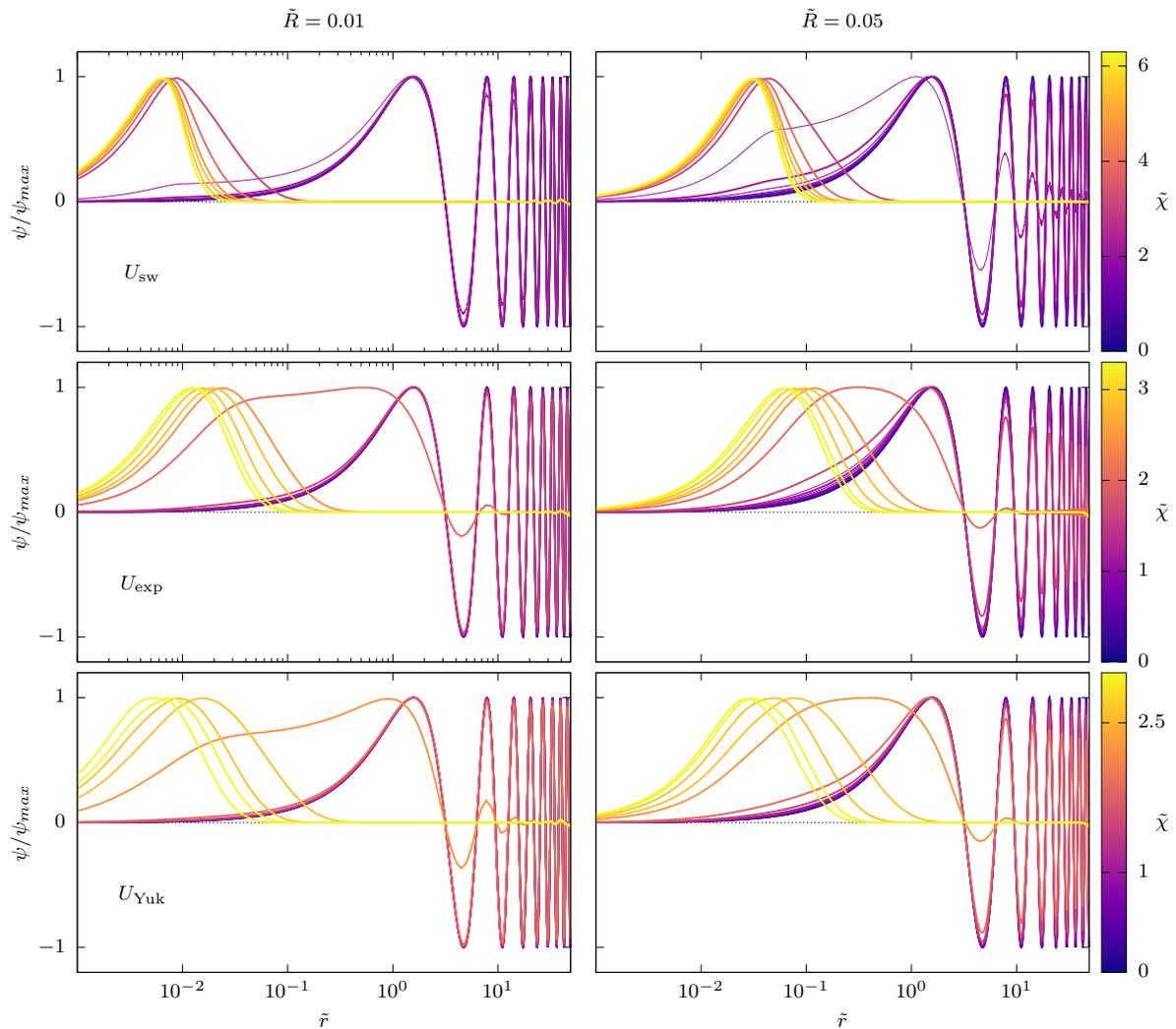


Figura 7.1: Gráficas de las funciones de pares normalizadas a su valor máximo: $\psi(r)/\psi_{max}(r)$, para los potenciales: pozo (sw), exponencial (exp) y Yukawa (Yuk) con los alcances: $\tilde{R} = 0.01, 0.05$. En la escala de colores se indican los diferentes valores de $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$. Las funciones de pares muestran un comportamiento muy claro, al aumentar el valor de $\tilde{\chi}$ las oscilaciones decrecen y la función se localiza en un valor de \tilde{r} cercano al alcance del potencial \tilde{R} , de esta manera las funciones de pares describen el crossover en el gas de Fermi, de un gas formado por pares de Cooper (función oscilante no localizada) a un estado formado por moléculas diatómicas (función sin oscilación y localizada).

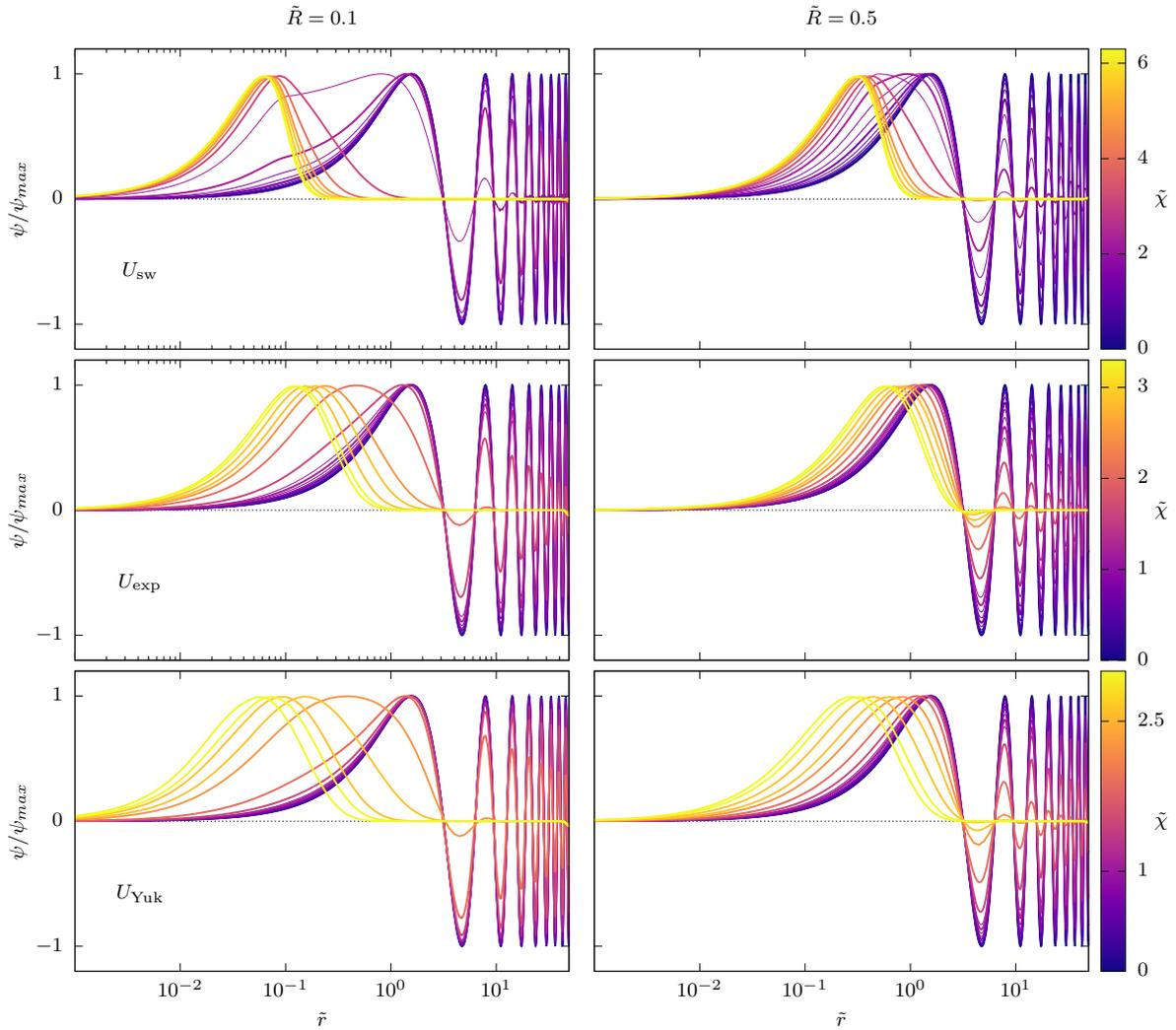


Figura 7.2: Gráficas de las funciones de pares normalizadas a su valor máximo: $\psi(r)/\psi_{max}(r)$, para los potenciales: pozo (sw), exponencial (exp) y Yukawa (Yuk) con los alcances: $\tilde{R} = 0.1, 0.5$. En la escala de colores se indican los diferentes valores de $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$. Las funciones de pares muestran un comportamiento muy claro, al aumentar el valor de $\tilde{\chi}$ las oscilaciones decrecen y la función se localiza en un valor de \tilde{r} cercano al alcance del potencial \tilde{R} , de esta manera las funciones de pares describen el crossover en el gas de Fermi, de un gas formado por pares de Cooper (función oscilante no localizada) a un estado formado por moléculas diatómicas (función sin oscilación y localizada).

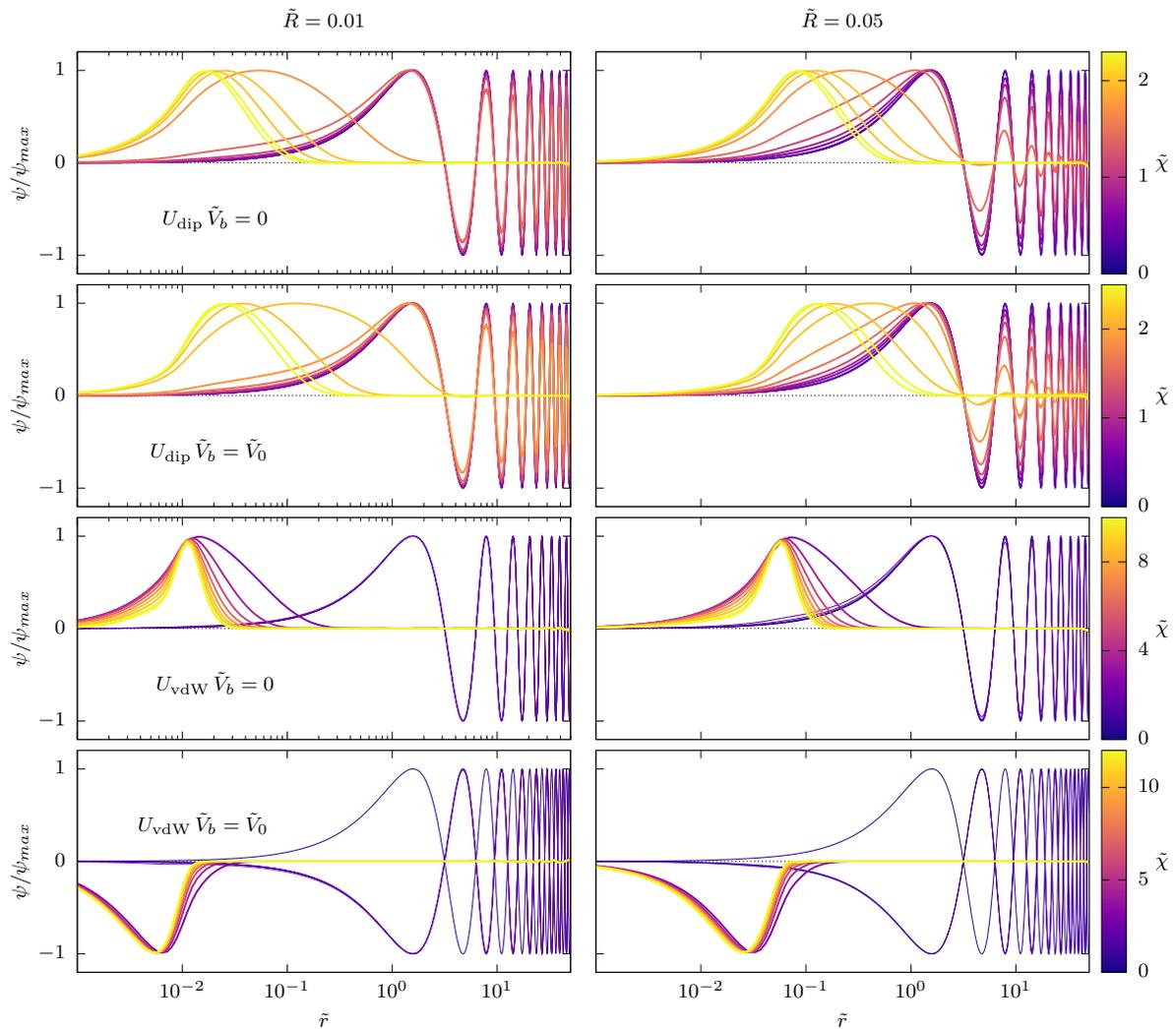


Figura 7.3: Gráficas de las funciones de pares normalizadas a su valor máximo: $\psi(r)/\psi_{max}(r)$, para los potenciales: dipolar (dip) y van der Waals (vdW), con barrera: $\tilde{V}_b = 0$ y $\tilde{V}_b = \tilde{V}_0$ y alcances: $\tilde{R} = 0.01, 0.05$. En la escala de colores se indican los diferentes valores de $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$. Las funciones de pares muestran un comportamiento muy claro, al aumentar el valor de $\tilde{\chi}$ las oscilaciones decrecen y la función se localiza en un valor de \tilde{r} cercano al alcance del potencial \tilde{R} , de esta manera las funciones de pares describen el crossover en el gas de Fermi, de un gas formado por pares de Cooper (función oscilante no localizada) a un estado formado por moléculas diatómicas (función sin oscilación y localizada).

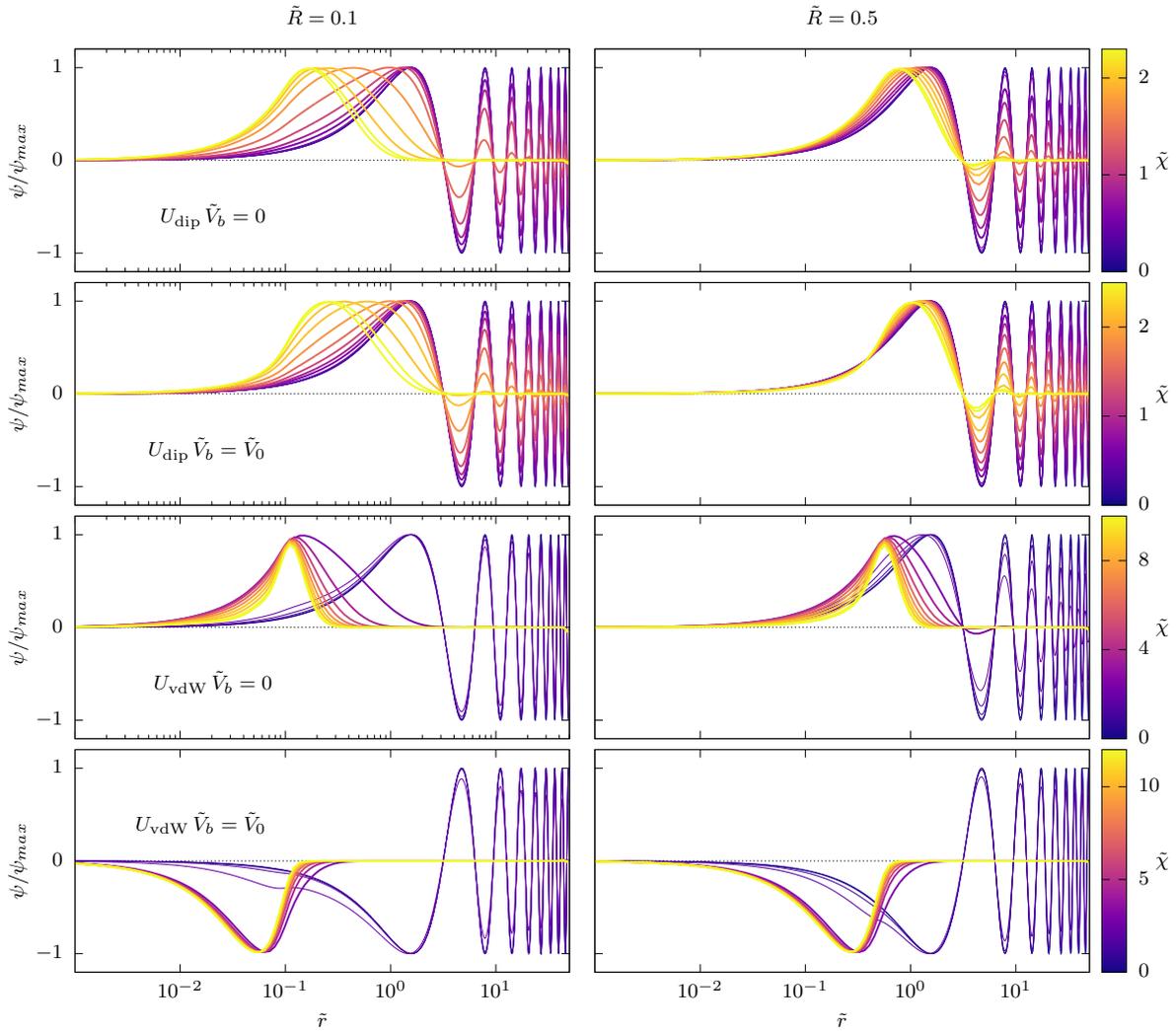


Figura 7.4: Gráficas de las funciones de pares normalizadas a su valor máximo: $\psi(r)/\psi_{\text{max}}(r)$, para los potenciales: dipolar (dip) y van der Waals (vdW), con barrera: $\tilde{V}_b = 0$ y $\tilde{V}_b = \tilde{V}_0$ y alcances: $\tilde{R} = 0.1, 0.5$. En la escala de colores se indican los diferentes valores de $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$. Las funciones de pares muestran un comportamiento muy claro, al aumentar el valor de $\tilde{\chi}$ las oscilaciones decrecen y la función se localiza en un valor de \tilde{r} cercano al alcance del potencial \tilde{R} , de esta manera las funciones de pares describen el crossover en el gas de Fermi, de un gas formado por pares de Cooper (función oscilante no localizada) a un estado formado por moléculas diatómicas (función sin oscilación y localizada).

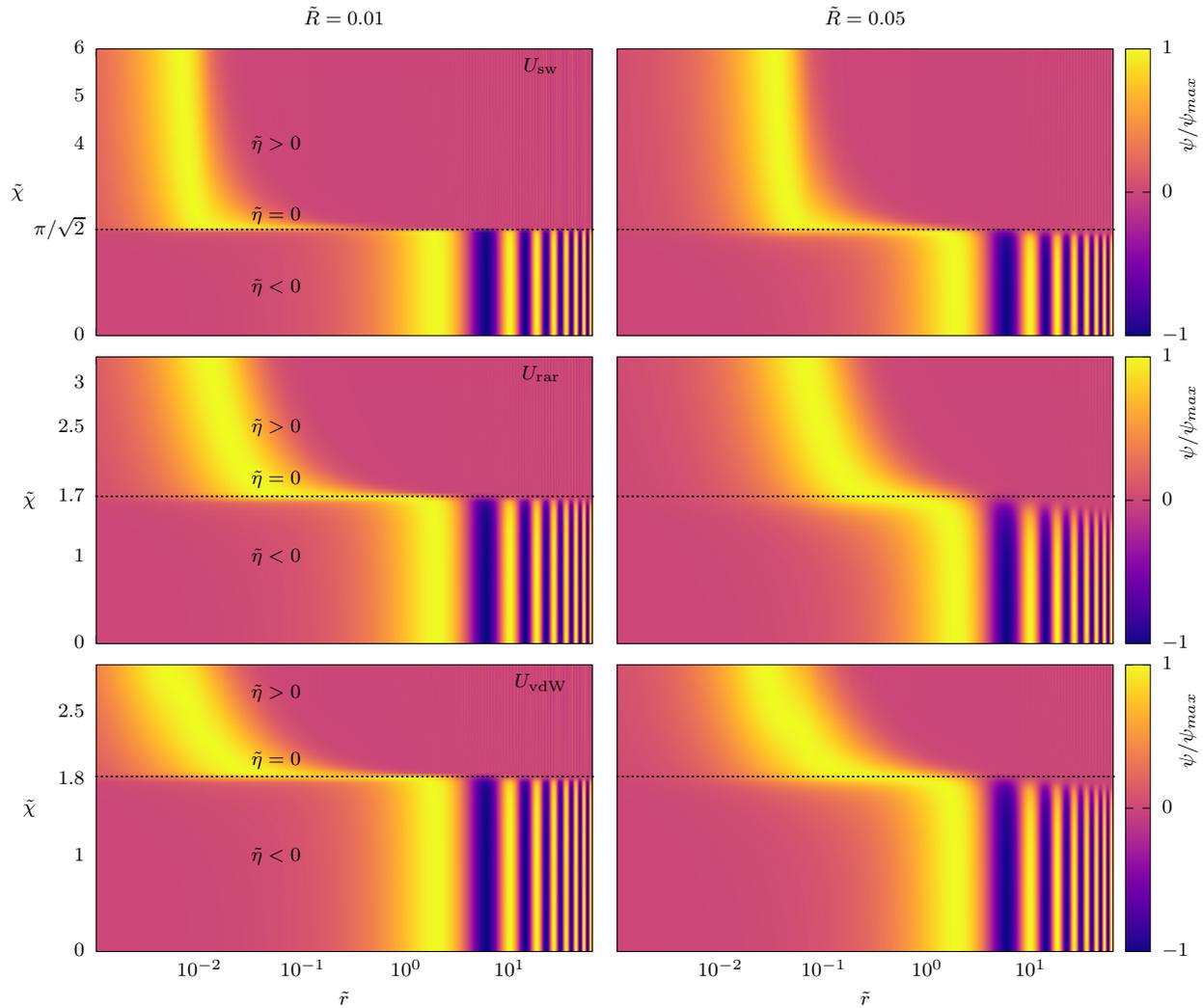


Figura 7.5: Gráficas de las funciones de pares para los potenciales: pozo (sw), exponencial (exp) y Yukawa (Yuk) con los alcances: $\tilde{R} = 0.01, 0.05$. El eje vertical corresponde a la variable: $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$ y la escala de colores indica el valor de la función de pares (normalizada a su valor máximo): $\psi(r)/\psi_{max}(r)$. En estas gráficas se puede apreciar claramente que el cambio de las funciones de pares se presenta para el valor de $\tilde{\chi}$ tal que: $\tilde{\eta} = 0$ ($\tilde{a} = \infty$) y que se indica con la línea vertical punteada.

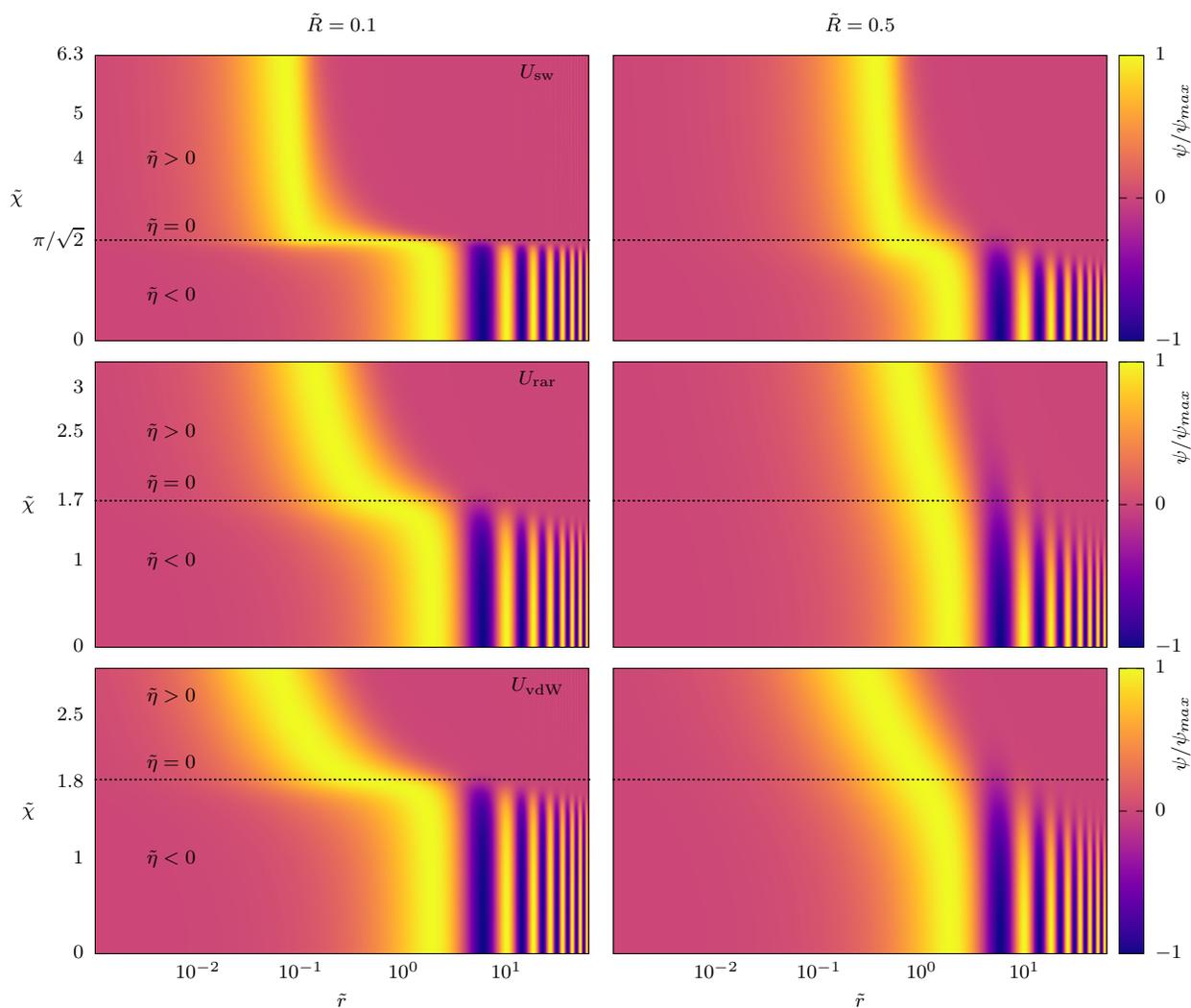


Figura 7.6: Gráficas de las funciones de pares para los potenciales: pozo (sw), exponencial (exp) y Yukawa (Yuk) con los alcances: $\tilde{R} = 0.1, 0.5$. El eje vertical corresponde al valor de $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$ y la escala de colores indica el valor de la función de pares (normalizada a su valor máximo): $\psi(r)/\psi_{max}(r)$. En estas gráficas se puede apreciar claramente que el cambio de las funciones de pares se presenta para el valor de $\tilde{\chi}$ tal que: $\tilde{\eta} = 0$ ($\tilde{a} = \infty$) y que se indica con la línea vertical punteada.

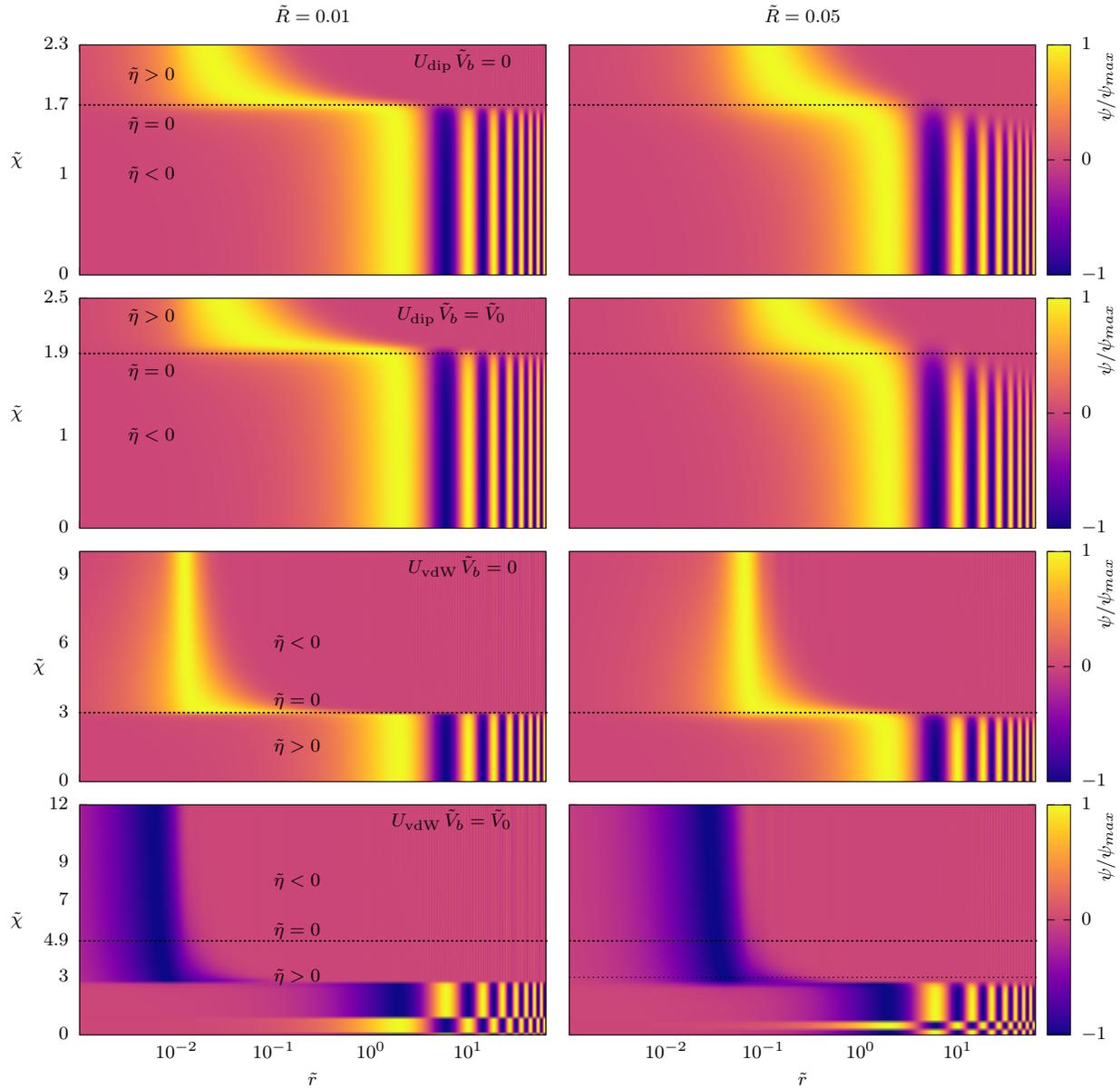


Figura 7.7: Gráficas de las funciones de pares para los potenciales: dipolar (dip) y van der Waals (vdW), con barrera: $\tilde{V}_b = 0$ y $\tilde{V}_b = \tilde{V}_0$ y alcances: $\tilde{R} = 0.01, 0.05$. El eje vertical corresponde al valor de $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$ y la escala de colores indica el valor de la función de pares (normalizada a su valor máximo): $\psi(r)/\psi_{\text{max}}(r)$. En estas gráficas se puede apreciar claramente que el cambio de las funciones de pares se presenta para el valor de $\tilde{\chi}$ tal que: $\tilde{\eta} = 0$ ($\tilde{a} = \infty$) y que se indica con la línea vertical punteada.

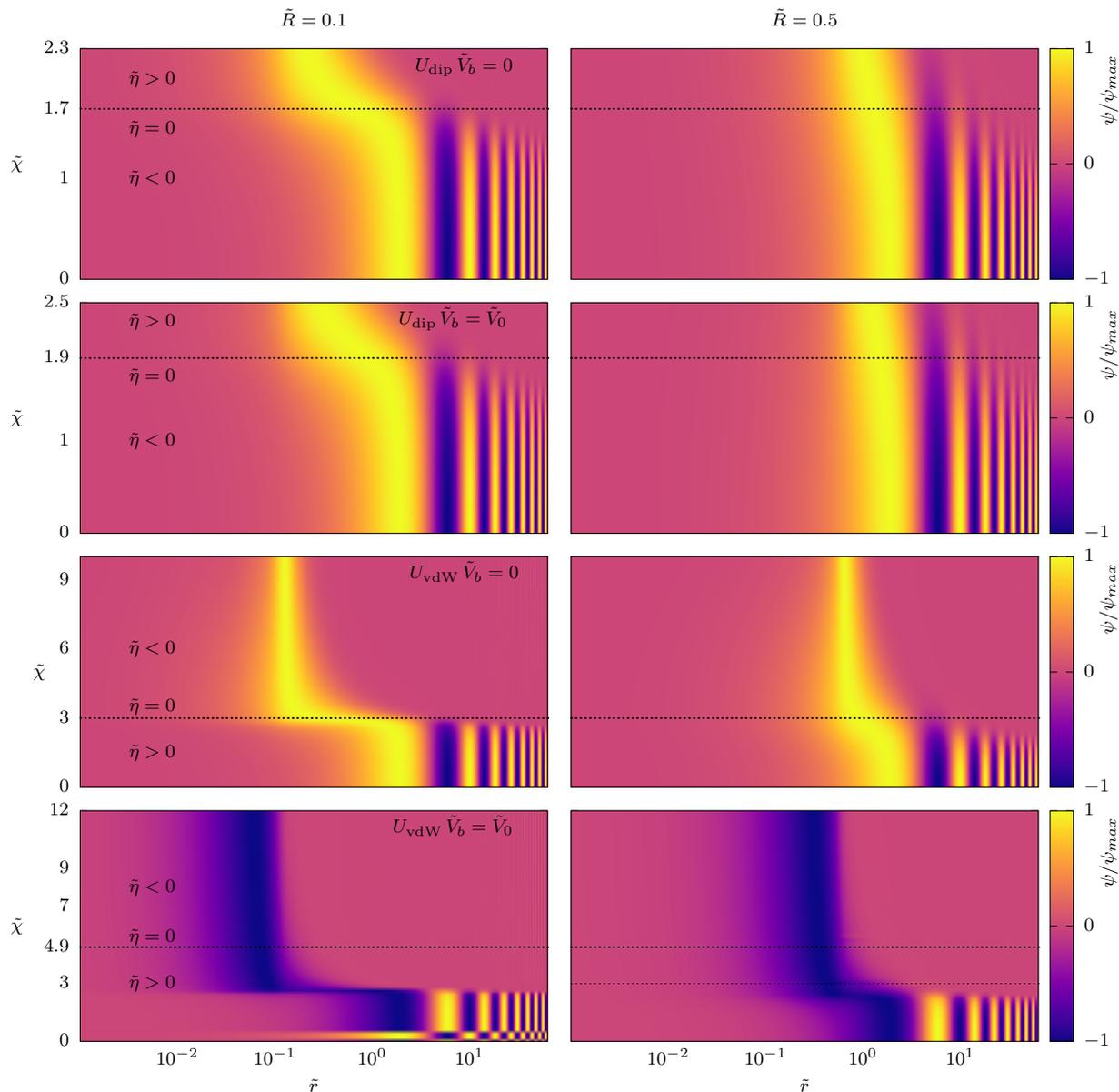


Figura 7.8: Gráficas de las funciones de pares para los potenciales: dipolar (dip) y van der Waals (vdW), con barrera: $\tilde{V}_b = 0$ y $\tilde{V}_b = \tilde{V}_0$ y alcances: $\tilde{R} = 0.01, 0.05$. El eje vertical corresponde al valor de $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$ y la escala de colores indica el valor de la función de pares (normalizada a su valor máximo): $\psi(r)/\psi_{\text{max}}(r)$. En estas gráficas se puede apreciar claramente que el cambio de las funciones de pares se presenta para el valor de $\tilde{\chi}$ tal que: $\tilde{\eta} = 0$ ($\tilde{a} = \infty$) y que se indica con la línea vertical punteada.

CAPÍTULO 8

Conclusiones.

EN este trabajo se estudiaron las propiedades termodinámicas así como los estados de pares, a temperatura cero de un gas de Fermi interactuante de dos componentes de espín, dentro del esquema del llamado *crossover* BCS-BEC. Se estudiaron el potencial químico, el gap, la presión y las diferentes energías asociadas al Hamiltoniano del gas de fermiones, así como las funciones de pares al variar las propiedades de interacción entre partículas.

El fenómeno del *crossover* consiste en la transición de un estado donde las partículas del gas forman pares de Cooper a un estado en el que las partículas forman dímeros (moléculas diatómicas con espín entero) al variar a longitud de dispersión de las partículas del gas, pasando de valores negativos a positivos. El modelo del *crossover*, originalmente descrito por Leggett, supone un gas de fermiones que interactúan a través de un potencial efectivo tipo *delta*, conocido como *potencial de contacto*, en la aproximación de campo medio. El uso del potencial delta para la interacción entre partículas conduce a divergencias en algunos términos de la energía que son “anuladas” a través de un desarrollo a segundo orden para la amplitud de dispersión.

Para abordar el fenómeno del *crossover*, en este trabajo se ha presentado un modelo de interacción entre partículas a través de diferentes potenciales de interacción: pozo de potencial, potencial exponencial, de Yukawa, dipolar con barrera y van der Waals con barrera. En general estos potenciales están caracterizados por dos parámetros: V_0 , R , que representan de manera efectiva, la profundidad o intensidad del potencial y su alcance, respectivamente. El fenómeno del *crossover* se logra al variar la intensidad del potencial V_0 para un alcance R constante, esto es posible debido al hecho que la longitud de dispersión depende del potencial de interacción y por lo tanto de los parámetros del potencial; entonces, primero se determinó la dependencia de la longitud de dispersión con estos parámetros para los potenciales modelos y se verificó que la longitud de dispersión toma valores negativos y positivos.

Con los resultados obtenidos se logró representar el fenómeno del *crossover* BCS-BEC en un gas de Fermi como la transición de un estado formado de pares de Cooper (BCS) a un estado de moléculas diatómicas (BEC), lo cual se pudo verificar a través de sus propiedades termodinámicas y de las funciones de pares del gas. Adicionalmente se presentó una forma de calcular la variable de contacto empleando un potencial de interacción finito, lo resultados

obtenidos para los potenciales de interacción estudiados son similares al modelo del potencial de contacto.

Uno de los principales resultados de este trabajo ha sido mostrar el comportamiento de las funciones de pares del gas y verificar que al variar la longitud de dispersión, o de acuerdo al modelo de interacción con un potencial finito la variable $\tilde{\chi}$, el gas transita de un estado BCS donde las funciones de pares de partículas del gas corresponden a pares de Cooper, a un estado BEC donde las funciones de pares están localizadas y corresponde a estados diatómicos confirmando así el modelo del crossover

En relación a las energías de Hartree-Fock, los resultados obtenidos presentan valores negativos de la presión y no es posible determinar con precisión si esto se deba directamente a los términos de Hartree-Fock o a posibles fallos del modelo para ciertos valores del alcance. En todo caso, queda por hacer un análisis más detallado del Hamiltoniano de interacción del gas de Fermi.

El modelo presentado aquí del crossover, usando varios potenciales de interacción entre partículas, ha dado resultados acorde al modelo más usual que emplea un potencial de contacto; sin embargo, este modelo tiene la ventaja de evitar las divergencias presentes en el modelo de interacción de contacto y permite estudiar el comportamiento de cada uno de los términos de la energía -esto no es posible con el modelo de contacto ya que el término de pares diverge-. Esto tienen una relevancia importante ya que la interacción de contacto es una aproximación burda de la interacción entre partículas y que al ser empleada en sistema de muchos cuerpos suele conducir a divergencias en algunos términos de la energía.

Ha resultado interesante notar que la variable adimensional: $z = R\sqrt{2m_r/V_0\hbar^2}$ o su equivalente en unidades de Fermi: $\tilde{\chi} = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$, por una parte, “surge” de manera “natural” como la variable de la longitud de dispersión para todos los potenciales de interacción estudiados aquí y que podríamos esperar para cualquier potencial de interacción de la forma: $U(r) = V_0 f(r/R)$; además, la misma variable puede ser usada en el sistema de muchos cuerpos que interactúan con el mismo potencial; esto no es del todo obvio ya que la longitud de dispersión proviene del análisis de la dispersión entre dos partículas y por lo tanto ajeno al problema de muchos cuerpos. Más aún, el hecho de que la transición del crossover, de un estado BCS a un estado BEC, se presente para el valor $\tilde{\chi}$ tal que la longitud de dispersión haga el cambio de signo es de resaltar. En este sentido los resultados obtenidos constatan el carácter *universal* del crossover cuando la longitud de dispersión diverge (o el inverso de la longitud es cero), hecho que ha llamado la atención en los últimos años. Más allá del fenómeno del crossover BCS-BEC, el modelo presentado puede servir también para abordar diferentes sistemas de fermiones con interacción, dentro del marco de la teoría BCS, ya que tiene carácter más general al modelar las interacciones entre partículas por un potencial general $U(r)$, en vez de reducirlo a una interacción efectiva representada por la longitud de dispersión.

Parte IV
Apéndices

Transformación de Bogoliubov-Valatin.

A.1. Hamiltoniano de un gas de Fermi con interacción.

EL hamiltoniano más general de un sistema de N partículas que interactúan por pares a través de un potencial central $U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ esta dado por:

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

donde $U_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i)$ corresponde a un potencial externo de confinamiento, en este trabajo consideraremos un **gas homogéneo** donde las partículas están confinadas en un volumen V y el potencial externo queda determinado de la siguiente manera:

$$U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{si } \vec{\mathbf{r}} \in V, \\ \infty & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

En general las partículas pueden estar sujetas a un potencial externo y esto ha cobrado relevancia en los últimos años debido a que en los experimentos con gases atómicos ultrafríos lo más adecuado es confinar los átomos mediante campos electromagnéticos externos que resultan en diferentes configuraciones de potenciales externos, lo más común resulta en un potencial armónico: $U(r) = m\omega^2 r^2/2$. Las propiedades termodinámicas en un gas, ya sea de fermiones o bosones, confinado por un potencial externo se pueden definir mediante *variables globales* análogas al volumen, la presión, etc. pero que dependen de los parámetros del potencial externo y tienen como consecuencia ciertas inhomogeneidades en el gas que pueden ser tratadas mediante la aproximación de densidad local [Sandoval-Figueroa and Romero-Rochín, 2008]. En este trabajo se considera un potencial externo homogéneo y en adelante se supondremos tal caso.

Para estudiar el hamiltoniano del sistema lo más conveniente es trabajar en el formalismo de segunda cuantización -espacio de Fock-, donde se definen los operadores de creación y ani-

quilación: $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$ y $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$, en el estado $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$; donde \mathbf{k} representa el momento de la partícula y σ su estado de espín, que se consideran dos estados: $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$. Para fermiones, estos operadores satisfacen las siguientes reglas conmutación:

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \right\} &\equiv \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}, \\ \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'} \right\} &= \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \right\} = 0, \quad \forall \mathbf{k}, \mathbf{k}' \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

En términos de estos operadores, y tomando en cuenta que el potencial de interacción $U(r)$ no depende del estado de espín de las partículas, entonces el hamiltoniano (A.1) se escribe de la siguiente manera¹:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\{\mathbf{k}_i, \sigma_i\}} U_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_1, \sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2, \sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_3, \sigma_3} \hat{a}_{\mathbf{k}_4, \sigma_4}, \quad (\text{A.4})$$

el primer término corresponde a la energía cinética, que denotaremos como $\hat{\mathcal{H}}_K$, y el segundo a la energía de interacción², $\hat{\mathcal{H}}_{int}$. Empleando los operadores de número: $\hat{n}_{\vec{k},\sigma} \equiv \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$, entonces el término de energía cinética se puede escribir como:

$$\hat{\mathcal{H}}_K = \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma} = \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\vec{k},\sigma}, \quad (\text{A.5})$$

donde $\epsilon_{\mathbf{k},\sigma}$, corresponde a la energía de partícula libre de masa m con momento \mathbf{k} , (independiente del estado de espín de los fermiones):

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \langle \mathbf{k}, \sigma | \frac{\hat{p}^2}{2m} | \mathbf{k}, \sigma \rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (\text{A.6})$$

si los estados de partícula libre con momento \vec{k} son:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}}, \quad (\text{A.7})$$

Para el término de interacción se considera que el potencial de interacción entre pares de partículas, $U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$, es independiente del espín y por lo tanto:

$$\langle \mathbf{k}_1 \sigma_1, \mathbf{k}_2 \sigma_2 | U | \mathbf{k}_3 \sigma_3, \mathbf{k}_4 \sigma_4 \rangle = \delta_{\sigma_1, \sigma_3} \delta_{\sigma_2, \sigma_4} \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | U | \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \rangle, \quad (\text{A.8})$$

de esta manera, la suma de la ecuación (A.4) en los estados de espín: σ_i ($i = 1, 2, 3, 4$), se restringe únicamente a dos índices de espín: σ, σ' . Así, los elementos de matriz del potencial de interacción: $U_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} = \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | U | \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \rangle$ vienen dados por la siguiente expresión:

¹El procedimiento para obtener el hamiltoniano en segunda cuantización se puede consultar en textos avanzados de mecánica cuántica, teoría de muchos cuerpos o estado solido, por ejemplo: [Alexander L. Fetter, 1971][Philip L Taylor, 2002].

²En principio, la suma corre sobre cuatro indices; sin embargo, como veremos a continuación los indices en el espín se restringen a dos, además por conservación de momento el índice en los vectores de momento se limitan a tres.

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | U | \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \rangle &\equiv \frac{1}{V^2} \int \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 \phi_{\mathbf{k}_1}^* (\mathbf{r}_1) \phi_{\mathbf{k}_2}^* (\mathbf{r}_2) U (|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \phi_{\mathbf{k}_3} (\mathbf{r}_2) \phi_{\mathbf{k}_4} (\mathbf{r}_1), \\
&= \frac{1}{V^2} \int \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} e^{i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}_2} e^{i\mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{r}_1} U (|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|);
\end{aligned} \tag{A.9}$$

La integral se simplifica introduciendo las coordenadas de centro de masa: $\vec{\mathbf{R}} = \frac{1}{2} (\vec{\mathbf{r}}_1 + \vec{\mathbf{r}}_2)$ y relativa: $\vec{\mathbf{r}} = \vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2$ para un sistema de dos partículas con igual masa:

$$U_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} = \frac{1}{V^2} \int e^{i[(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) + (\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2)] \cdot \mathbf{R}} d^3 \mathbf{R} \int e^{\frac{1}{2} i[(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) - (\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2)] \cdot \mathbf{r}} U (r) d^3 \mathbf{r}, \tag{A.10}$$

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

$$\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \tag{A.11}$$

que representa la conservación del momento en el proceso de colisión entre dos partículas con momentos: $\vec{\mathbf{k}}_3, \vec{\mathbf{k}}_4$ antes de la colisión y $\vec{\mathbf{k}}_1, \vec{\mathbf{k}}_2$ después de la colisión. Así los elementos de matriz del potencial de interacción, que en principio tienen tres índices, se reducen a dos:

$$U_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} = \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \frac{1}{V} U_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2}, \quad \text{donde: } U_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2} = \int e^{-i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}} U (r) d^3 \mathbf{r}. \tag{A.12}$$

Así, el término de interacción del hamiltoniano se expresa como:

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3; \sigma, \sigma'} U_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2, \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_3, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}_4, \sigma}, \tag{A.13}$$

(importante notar que: $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3$) para entender mejor el término de interacción, definimos lo siguiente:

$$\begin{aligned}
\vec{\mathbf{q}} &\equiv \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 \\
\mathbf{k}_4 &\equiv \mathbf{k} &\Rightarrow \mathbf{k}_1 &= \mathbf{k} - \vec{\mathbf{q}} \\
\mathbf{k}_3 &\equiv \mathbf{k}' && \mathbf{k}_2 &= \mathbf{k}' + \vec{\mathbf{q}}
\end{aligned} \tag{A.14}$$

el término de interacción se se puede escribir como:

$$\hat{\mathcal{H}}_{int} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \vec{\mathbf{q}}; \sigma, \sigma'} U_{\vec{\mathbf{q}}} \hat{a}_{\mathbf{k} - \vec{\mathbf{q}}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}' + \vec{\mathbf{q}}, \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad \text{donde: } U_{\vec{\mathbf{q}}} = \int e^{-i\vec{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{r}} U (r) d^3 \mathbf{r}. \tag{A.15}$$

que se puede interpretar como dos partículas *destruidas* en los estados: (\mathbf{k}, σ) , (\mathbf{k}', σ') y dos partículas *creadas* en los estados: $(\mathbf{k}' + \vec{\mathbf{q}}, \sigma')$, $(\mathbf{k} - \vec{\mathbf{q}}, \sigma)$.

A.2. Energía de Hartree, de Fock y de pares.

Energía de Hartree, $\vec{q} = 0$.

En este caso:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_H &= \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} U_0 \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \\ &= (-1)^2 \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'} = \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} n_{\mathbf{k}, \sigma} n_{\mathbf{k}', \sigma'},\end{aligned}\quad (\text{A.16})$$

donde:

$$U_0 = \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \int e^{-i\vec{q} \cdot \mathbf{r}} U(r) d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{A.17})$$

Explícitamente la suma sobre el espín:

$$n_{\mathbf{k}\uparrow} (n_{\mathbf{k}'\uparrow} + n_{\mathbf{k}'\downarrow}) + n_{\mathbf{k}\downarrow} (n_{\mathbf{k}'\uparrow} + n_{\mathbf{k}'\downarrow}) = (n_{\mathbf{k}\uparrow} + n_{\mathbf{k}\downarrow}) (n_{\mathbf{k}'\uparrow} + n_{\mathbf{k}'\downarrow}). \quad (\text{A.18})$$

Finalmente el término de Hartree queda como:

$$\hat{\mathcal{H}}_H = \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (n_{\mathbf{k}\uparrow} + n_{\mathbf{k}\downarrow}) (n_{\mathbf{k}'\uparrow} + n_{\mathbf{k}'\downarrow}) \quad (\text{A.19})$$

Como la suma en \mathbf{k} y \mathbf{k}' son independientes entonces $\hat{\mathcal{H}}_H = \frac{U_0}{2V} [\sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}\uparrow} + n_{\mathbf{k}\downarrow})]^2$. La energía de Hartree es negativa para un potencial de interacción atractivo, ya que en este caso $U_0 < 0$.

Energía de Fock, $\vec{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$.

En este caso:

$$\hat{\mathcal{H}}_F = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}', \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma} = (-1) \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \sigma, \sigma'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}', \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (\text{A.20})$$

donde:

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} U(r) d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{A.21})$$

La suma en los índices de espín se puede separar en cuatro términos, que se describen a continuación:

$$\begin{array}{ccccccc} a_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger & a_{\mathbf{k}', \sigma'} & a_{\mathbf{k}, \sigma'}^\dagger & a_{\mathbf{k}, \sigma} & & & \\ \mathbf{k}', \uparrow & \mathbf{k}, \uparrow & \mathbf{k}', \uparrow & \mathbf{k}, \uparrow & \Rightarrow & a_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}', \uparrow} a_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \uparrow} & = n_{\mathbf{k}\uparrow} n_{\mathbf{k}'\uparrow} \\ \mathbf{k}', \uparrow & \mathbf{k}, \downarrow & \mathbf{k}', \downarrow & \mathbf{k}, \uparrow & \Rightarrow & a_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}', \downarrow} a_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \uparrow} & \\ \mathbf{k}', \downarrow & \mathbf{k}, \uparrow & \mathbf{k}', \uparrow & \mathbf{k}, \downarrow & \Rightarrow & a_{\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}', \uparrow} a_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \downarrow} & \\ \mathbf{k}', \downarrow & \mathbf{k}, \downarrow & \mathbf{k}', \downarrow & \mathbf{k}, \downarrow & \Rightarrow & a_{\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}', \downarrow} a_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \downarrow} & = n_{\mathbf{k}\downarrow} n_{\mathbf{k}'\downarrow} \end{array} \quad (\text{A.22})$$

El término de la energía de Fock queda como:

$$\hat{\mathcal{H}}_F = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}\uparrow} + n_{\mathbf{k}\downarrow}) (n_{\mathbf{k}'\uparrow} + n_{\mathbf{k}'\downarrow}) \quad (\text{A.23})$$

Energía de pares.

Este término corresponde a la destrucción de dos partículas como momentos opuestos: \mathbf{k} , $-\mathbf{k}$ y por conservación de momento crea dos partículas en estados opuesto también: \mathbf{k}' , $-\mathbf{k}'$, en este caso se tiene lo siguiente:

$$\hat{\mathcal{H}}_p = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \sigma; \mathbf{k}', \sigma'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger a_{-\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger a_{-\mathbf{k}, \sigma'} a_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (\text{A.24})$$

donde:

$$U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} U(r) d^3\mathbf{r}. \quad (\text{A.25})$$

La suma sobre los espines se puede separar en cuatro términos bien definidos:

$$\begin{array}{ccccccc} a_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger & a_{-\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger & a_{-\mathbf{k}, \sigma'} & a_{\mathbf{k}, \sigma} & & & \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \Rightarrow & a_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}, \uparrow} a_{\mathbf{k}, \uparrow} & \\ \uparrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow & \Rightarrow & a_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}, \downarrow} a_{\mathbf{k}, \uparrow} & \\ \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \Rightarrow & a_{\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}, \uparrow} a_{\mathbf{k}, \downarrow} & \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \Rightarrow & a_{\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}, \downarrow} a_{\mathbf{k}, \downarrow} & \end{array} \quad (\text{A.26})$$

De acuerdo a la teoría BCS, los términos con igual espín se desprecian [Philip L Taylor, 2002]... y los dos términos medios son iguales bajo el intercambio $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ por lo que se suman y finalmente el término de pares queda como:

$$\hat{\mathcal{H}}_p = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}, \uparrow} a_{-\mathbf{k}, \downarrow}. \quad (\text{A.27})$$

Notar que tanto para el término de Hartree y de Fock, la suma en \mathbf{k} es independiente del espín y abarca todos los valores posibles de \mathbf{k} , por lo tanto sin pérdida de generalidad es posible simplificar la notación de la siguiente manera: $\mathbf{k}, \uparrow \equiv \mathbf{k}$ y $\mathbf{k}, \downarrow \equiv -\mathbf{k}$, esto permite incluir el espín en el signo del vector de momento y además no altera el término de pares. En adelante se sigue esta convención.

Hamiltoniano de un sistema de fermiones en la aproximación de campo medio:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_K + \hat{\mathcal{H}}_H + \hat{\mathcal{H}}_F + \hat{\mathcal{H}}_p \quad (\text{A.28})$$

donde:

$$\begin{aligned}
\text{Término ideal:} \quad & \hat{\mathcal{H}}_K = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) (n_{\mathbf{k}} + n_{-\mathbf{k}}) \\
\text{Término de Hartree:} \quad & \hat{\mathcal{H}}_H = \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}} + n_{-\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{k}'} (n_{\mathbf{k}'} + n_{-\mathbf{k}'}) \\
\text{Término de Fock:} \quad & \hat{\mathcal{H}}_F = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} (n_{\mathbf{k}\uparrow} n_{\mathbf{k}'\uparrow} + n_{\mathbf{k}\downarrow} n_{\mathbf{k}'\downarrow}) \\
\text{Término de pares:} \quad & \hat{\mathcal{H}}_p = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} a_{-\mathbf{k}\downarrow}
\end{aligned} \tag{A.29}$$

A.3. Transformación de Bogoliubov-Valatin.

Se define la transformación de Bogoliubov-Valatin para fermiones a través de los siguientes operadores:

$$\begin{aligned}
\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} &\equiv u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \\
\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} &\equiv u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow} + v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger;
\end{aligned} \tag{A.30}$$

a partir de la cual, la transformación inversa se expresa como:

$$\begin{aligned}
\hat{a}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger, \\
\hat{a}_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger.
\end{aligned} \tag{A.31}$$

Los *operadores de Bogoliubov* $\hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}$ satisfacen las reglas usuales de anticonmutación para fermiones:

$$\begin{aligned}
\{\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger\} &= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \\
\{\alpha_{\mathbf{k}}, \alpha_{\mathbf{k}'}\} &= \{\alpha_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, \alpha_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger\} = 0.
\end{aligned} \tag{A.32}$$

Para garantizar que estos operadores correspondan a una transformación unitaria deben satisfacer lo siguiente:

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \tag{A.33}$$

Los *operadores de número* en la representación de los operadores de Bogoliubov están dados por:

$$\begin{aligned}
\hat{m}_{\mathbf{k}} &\equiv \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \\
\hat{m}_{-\mathbf{k}} &\equiv \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}.
\end{aligned} \tag{A.34}$$

Definidos los operadores de Bogoliubov ($\hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}$) y sus correspondientes operadores de número ($\hat{m}_{\pm\mathbf{k}}$), a continuación se describe como se aplica esta transformación al hamiltoniano de campo medio (A.28).

Para simplificar los cálculos se definen los siguientes operadores:

$$\begin{aligned}\hat{\Gamma}_{\pm\mathbf{k}} &\equiv u_{\mathbf{k}}^2 \hat{m}_{\pm\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^2 \hat{m}_{\mp\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2, \\ \hat{\Pi}_{\mathbf{k}} &= 2v_{\mathbf{k}}^2 + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}), \\ \hat{\Lambda}_{\pm\mathbf{k}} &\equiv \hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mp\mathbf{k}}^\dagger + \hat{\alpha}_{\mp\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}.\end{aligned}\tag{A.35}$$

de las propiedades de los operadores $(\hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}^\dagger)$ se tienen las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned}\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}} + \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}} &= \hat{\Pi}_{\mathbf{k}} \\ \Lambda_{+\mathbf{k}} + \Lambda_{-\mathbf{k}} &= 0\end{aligned}\tag{A.36}$$

es importante notar que cualquier par de operadores en \mathbf{k} y \mathbf{k}' conmutan ya que son índices independientes.

Sustituyendo los operadores de Bogoliubov en los operadores de número de fermiones:

$$\begin{aligned}\hat{n}_{\pm\mathbf{k}} = \hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}} &= \left[u_{\mathbf{k}} \alpha_{\pm\mathbf{k}}^\dagger \pm v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mp\mathbf{k}} \right] \times \left[u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}} \pm v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mp\mathbf{k}}^\dagger \right] \\ &= u_{\mathbf{k}}^2 \left(\alpha_{\pm\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\pm\mathbf{k}} \right) + v_{\mathbf{k}}^2 \left(\alpha_{\mp\mathbf{k}} \alpha_{\mp\mathbf{k}}^\dagger \right) \pm u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \alpha_{\pm\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mp\mathbf{k}}^\dagger \pm u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mp\mathbf{k}} \alpha_{\pm\mathbf{k}} \\ &= u_{\mathbf{k}}^2 m_{\pm\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2 (1 - m_{\mp\mathbf{k}}) \pm u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(\alpha_{\pm\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mp\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{\mp\mathbf{k}} \alpha_{\pm\mathbf{k}} \right) \\ &= u_{\mathbf{k}}^2 m_{\pm\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}^2 m_{\mp\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2 \pm u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(\alpha_{\pm\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mp\mathbf{k}}^\dagger + \alpha_{\mp\mathbf{k}} \alpha_{\pm\mathbf{k}} \right),\end{aligned}\tag{A.37}$$

identificando las relaciones (A.35) se obtiene:

$$\hat{n}_{\pm\mathbf{k}} = \hat{\Gamma}_{\pm\mathbf{k}} \pm u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\Lambda}_{\pm\mathbf{k}},\tag{A.38}$$

de donde se obtienen los siguientes resultados:

$$\begin{aligned}\hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}} &= \hat{\Pi}_{\mathbf{k}} + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}}. \\ \hat{n}_{\pm\mathbf{k}} \hat{n}_{\pm\mathbf{k}'} &= \hat{\Gamma}_{\pm\mathbf{k}} \hat{\Gamma}_{\pm\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \hat{\Gamma}_{\pm\mathbf{k}} \hat{\Lambda}_{\pm\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\Lambda}_{\pm\mathbf{k}} \hat{\Gamma}_{\pm\mathbf{k}'}.\end{aligned}\tag{A.39}$$

Notar que se han despreciado los productos de cuatro operadores: $u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} \approx 0$. Con esto, el número de partículas queda expresado como:

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{k}} \left(\hat{\Pi}_{\mathbf{k}} + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} \right).\tag{A.40}$$

Sustituyendo en cada uno de los términos del hamiltoniano de campo medio se obtienen los siguientes resultados.

Para el **término ideal** la sustitución es directa:

$$\hat{\mathcal{H}}_K = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \left[\hat{\Pi}_{\mathbf{k}} + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} \right]\tag{A.41}$$

en el caso de **término de Hartree** se obtiene tiene lo siguiente:

$$\hat{\mathcal{H}}_H = \frac{\tilde{U}_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(\hat{\Pi}_{\mathbf{k}} + 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} \right) \left(\hat{\Pi}_{\mathbf{k}'} + 2u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}'} \right) = \frac{\tilde{U}_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(\hat{\Pi}_{\mathbf{k}}\hat{\Pi}_{\mathbf{k}'} + 4u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}}\hat{\Pi}_{\mathbf{k}'} \right) \quad (\text{A.42})$$

una vez más se supone: $u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}'}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} \approx 0$ y para realizar la suma: $2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}}\hat{\Pi}_{\mathbf{k}'} + 2u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'}\hat{\Pi}_{\mathbf{k}}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}'} = 4\hat{\Pi}_{\mathbf{k}'}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}}$, simplemente se intercambia: $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$.

Para el **término de Fock** se tiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_F &= -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \left[\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}}\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}'} + \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}}\hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} \left(\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}'} + \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}}\hat{\Lambda}_{-\mathbf{k}'} \right) + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \left(\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}'}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} + \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}'}\hat{\Lambda}_{-\mathbf{k}} \right) \right] \\ &= -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \left[\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}}\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}'} + \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}}\hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} \left(\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}} - \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}} \right) \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \left(\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}'} - \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}'} \right) \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} \right] \\ &= -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \left[\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}}\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}'} + \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}}\hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'}\hat{\Pi}_{\mathbf{k}}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}'} + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\hat{\Pi}_{\mathbf{k}'}\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} \right] \\ &= -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \left[\Gamma_{\mathbf{k}}\Gamma_{\mathbf{k}'} + \Gamma_{-\mathbf{k}}\Gamma_{-\mathbf{k}'} + 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\Lambda_{\mathbf{k}}\Pi_{\mathbf{k}'} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

donde la última igualdad se obtuvo de la misma forma que con el término de Hartree, es decir intercambiando $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$.

Para el **término de pares** se tiene primero el producto de los siguientes pares de operadores:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}'}^\dagger &= \left(u_{\mathbf{k}'}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^\dagger + v_{\mathbf{k}'}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}'}^\dagger \right) \left(u_{\mathbf{k}'}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}'}^\dagger - v_{\mathbf{k}'}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^\dagger \right) \\ &= u_{\mathbf{k}'}^2 \left(\alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}'}^\dagger \right) - v_{\mathbf{k}'}^2 \left(\alpha_{-\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}'} \right) + u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} \left(1 - m_{\mathbf{k}'} - m_{-\mathbf{k}'} \right) \\ a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} &= \left(u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \right) \left(u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \\ &= u_{\mathbf{k}}^2 \left(\alpha_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \right) - v_{\mathbf{k}}^2 \left(\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \left(1 - m_{\mathbf{k}} - m_{-\mathbf{k}} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

con lo cual el producto de los cuatro operadores:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}'}^\dagger a_{-\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} \left(1 - m_{\mathbf{k}'} - m_{-\mathbf{k}'} \right) \left[u_{\mathbf{k}}^2 \left(\alpha_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \right) - v_{\mathbf{k}}^2 \left(\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \right] + \\ &+ \left[u_{\mathbf{k}'}^2 \left(\alpha_{\mathbf{k}'}^\dagger \alpha_{-\mathbf{k}'}^\dagger \right) - v_{\mathbf{k}'}^2 \left(\alpha_{-\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}'} \right) \right] u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \left(1 - m_{\mathbf{k}} - m_{-\mathbf{k}} \right) + \\ &+ u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \left(1 - m_{\mathbf{k}'} - m_{-\mathbf{k}'} \right) \left(1 - m_{\mathbf{k}} - m_{-\mathbf{k}} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

donde se han eliminado los productos de cuatro operadores, además intercambiando $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$, se pueden factorizar los dos primeros términos de tal manera que el resultado final para el término de pares queda dado por:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_p &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - m_{\mathbf{k}'} - m_{-\mathbf{k}'}) (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \Lambda_{\mathbf{k}} + \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (1 - m_{\mathbf{k}'} - m_{-\mathbf{k}'}) (1 - m_{\mathbf{k}} - m_{-\mathbf{k}})\end{aligned}\quad (\text{A.46})$$

Finalmente cada uno de los términos del hamiltoniano completo, ecuación (A.47), en términos de los operadores de Bogoliubov están dados por la siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_K &= \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \left[\hat{\Pi}_{\mathbf{k}} + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} \right] \\ \hat{\mathcal{H}}_H &= \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[\hat{\Pi}_{\mathbf{k}} \hat{\Pi}_{\mathbf{k}'} + 4u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} \right] \\ \hat{\mathcal{H}}_F &= -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left[\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}} \hat{\Gamma}_{\mathbf{k}'} + \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}} \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}'} + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} \hat{\Pi}_{\mathbf{k}'} \right] \\ \hat{\mathcal{H}}_p &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} + \\ &+ \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}})\end{aligned}\quad (\text{A.47})$$

A.4. Diagonalización.

De acuerdo al método de Bogoliubov-Valantin [Alexander L. Fetter, 1971] los parámetros $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ se determinan al diagonalizar el hamiltoniano total del gas de fermiones, para ello se hacen cero todos aquellos términos que contengan al operador: $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}} \equiv \hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mp\mathbf{k}}^\dagger + \hat{\alpha}_{\mp\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\pm\mathbf{k}}$. De esta manera el efectivo es diagonal en la base de los operadores de número $m_{\pm\mathbf{k}}$. Se debe notar que los términos del hamiltoniano en la nueva base de operadores, ecuación (A.47), son sumas sobre \mathbf{k} y \mathbf{k}' por lo que es necesario que anular para todo \mathbf{k} los operadores $\hat{\Lambda}_{\mathbf{k}}$, lo cual conlleva a la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned}2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left[(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) + \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'} - \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \Pi_{\mathbf{k}'} \right] + \\ + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - m_{\mathbf{k}'} - m_{-\mathbf{k}'}) = 0.\end{aligned}\quad (\text{A.48})$$

De esta ecuación, se define al *gap* $\Delta_{\mathbf{k}}$, la *energía de Hartree* ϵ_H y la *energía de Fock* ϵ_F de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\epsilon_H &= \frac{U_0}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \langle \hat{\Pi}_{\mathbf{k}'} \rangle, \\
\epsilon_F &= -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \langle \hat{\Pi}_{\mathbf{k}'} \rangle, \\
\Delta_{\mathbf{k}} &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - \langle \hat{m}_{\mathbf{k}'} \rangle - \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}'} \rangle),
\end{aligned} \tag{A.49}$$

la energía de Hartree y de Fock, aunque semejantes, difieren por un signo, un factor de un medio y además la energía de Fock depende de \mathbf{k} . La energía de Hartree y de Fock son negativa y positiva, respectivamente, para un potencial de interacción atractivo. Las tres ecuaciones anteriores comprenden un sistema de ecuaciones integrales para un potencial de interacción $U(r)$, cuyos elementos de matriz son $U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} U(r) d^3\mathbf{r}$; es decir, dado un potencial de interacción el sistema (A.49) se resuelve para el potencial químico μ , el gap $\Delta_{\mathbf{k}}$ y las energías de Hartree Fock ϵ_H , ϵ_F , donde además se debe considerar la ecuación del número de partículas. Con estas definiciones la ecuación (A.48) se expresa como:

$$2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \epsilon_H + \epsilon_F) - \Delta_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) = 0. \tag{A.50}$$

esta ecuación junto con la condición: $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$, determinan los parámetros $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$. Para resolver el sistema de ecuaciones, consideremos el cambio de variable:

$$\begin{aligned}
u_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2}(1 + x_{\mathbf{k}}) \\
v_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2}(1 - x_{\mathbf{k}}),
\end{aligned} \tag{A.51}$$

que sustituyendo en (A.50) se obtiene una ecuación cuadrática para $x_{\mathbf{k}}$:

$$\sqrt{1 - x_{\mathbf{k}}^2} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \epsilon_H + \epsilon_F) - \Delta_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}} = 0, \tag{A.52}$$

cuyo resultado es:

$$x_{\mathbf{k}} = \frac{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \quad \text{donde:} \quad \begin{aligned} \mathcal{E}_{\mathbf{k}} &\equiv \xi_{\mathbf{k}} + \epsilon_h + \epsilon_{f\mathbf{k}} \\ E_{\mathbf{k}} &\equiv \sqrt{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} \end{aligned} \tag{A.53}$$

De esta manera los operadores $\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}}$, $\hat{\Pi}_{\mathbf{k}}$ quedan expresados, en términos de los operadores $\hat{m}_{\pm\mathbf{k}}$, de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\hat{\Gamma}_{\pm\mathbf{k}} &= \frac{1}{2}x_{\mathbf{k}}(\hat{m}_{\pm\mathbf{k}} + \hat{m}_{\mp\mathbf{k}}) + \frac{1}{2}(\hat{m}_{\pm\mathbf{k}} - \hat{m}_{\mp\mathbf{k}}) + \frac{1}{2}(1 - x_{\mathbf{k}}), \\
\hat{\Pi}_{\mathbf{k}} &= (1 - x_{\mathbf{k}}) + x_{\mathbf{k}}(\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}).
\end{aligned} \tag{A.54}$$

por otra parte, se tienen las siguientes relaciones de los parámetros $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{2}\sqrt{1-x_{\mathbf{k}}^2} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} \\ u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 &= x_{\mathbf{k}} = \frac{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

(de aquí resulta claro que $\Delta_{\mathbf{k}}$ y $E_{\mathbf{k}}$ no pueden ser operadores ya que los parámetros $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ son números reales) Pasemos a sustituir los resultados en cada uno de los términos del hamiltoniano. Puesto que el número de partículas queda expresado como:

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{-\mathbf{k}}) = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Pi}_{\mathbf{k}}. \quad (\text{A.56})$$

$$\begin{aligned} \epsilon_H &= \frac{U_0}{V} N, \\ \epsilon_F &= -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} [(1-x_{\mathbf{k}}) + x_{\mathbf{k}}(\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}})], \\ \Delta_{\mathbf{k}} &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \frac{\mathcal{E}_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}'}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}), \end{aligned} \quad (\text{A.57})$$

por otra parte, para el término de Hartree $\hat{\mathcal{H}}_H$ queda como:

Para el término de Fock, se tiene el siguiente resultado para el producto de los siguientes operadores:

$$\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}}\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}'} + \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}}\hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}'} = \frac{1}{2} \left[\hat{\Pi}_{\mathbf{k}}\hat{\Pi}_{\mathbf{k}'} + (\hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}})(\hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) \right] \quad (\text{A.58})$$

consideramos que $\langle \hat{m}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{m}_{-\mathbf{k}} \rangle$ y por lo tanto: $\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}}\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}'} + \hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}}\hat{\Gamma}_{-\mathbf{k}'} = \frac{1}{2}\hat{\Pi}_{\mathbf{k}}\hat{\Pi}_{\mathbf{k}'}$, de la ecuación (A.54) también se obtiene que $1 - m_{\mathbf{k}} - m_{-\mathbf{k}} = (1 - \Pi_{\mathbf{k}})/x_{\mathbf{k}}$, entonces el término de manera que finalmente los términos de la energía quedan como:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_K &= \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{\Pi}_{\mathbf{k}}, \\ \hat{\mathcal{H}}_H &= \frac{U_0}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{\Pi}_{\mathbf{k}}\hat{\Pi}_{\mathbf{k}'}, \\ \hat{\mathcal{H}}_F &= -\frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \hat{\Pi}_{\mathbf{k}}, \\ \hat{\mathcal{H}}_p &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}) \end{aligned} \quad (\text{A.59})$$

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_K &= \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) [(1 - x_{\mathbf{k}}) + x_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}})], \\
\hat{\mathcal{H}}_H &= \frac{U_0}{2V} N^2 \\
\hat{\mathcal{H}}_F &= -\frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} [(1 - x_{\mathbf{k}}) + x_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}})], \\
\hat{\mathcal{H}}_p &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}})
\end{aligned} \tag{A.60}$$

Para sumar los cuatro términos hay que notar lo siguiente:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 - \mu \hat{N} + 2\hat{\mathcal{H}}_H + 2\hat{\mathcal{H}}_F + 2\hat{\mathcal{H}}_p = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} (\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}), \tag{A.61}$$

es decir, si: $\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N} = \hat{\mathcal{H}}_0 - \mu \hat{N} + \hat{\mathcal{H}}_H + \hat{\mathcal{H}}_F + \hat{\mathcal{H}}_p$, entonces:

$$\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} (\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - \hat{\mathcal{H}}_H - \hat{\mathcal{H}}_F - \hat{\mathcal{H}}_p, \tag{A.62}$$

sustituyendo en esta expresión cada uno de los términos de la ecuación (A.60) y simplificando se obtiene el resultado final:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N} &= \sum_{\mathbf{k}} \left[E_{\mathbf{k}} - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F) \mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} \right] (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \\
&+ \sum_{\mathbf{k}} \left[\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E_{\mathbf{k}}} + \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F) \mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F)}{2} \right],
\end{aligned} \tag{A.63}$$

definiendo: $\mathcal{E}_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F) \mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}$ se puede expresar como:

$$\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_{\mathbf{k}} (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} \left[\mathcal{E}_{\mathbf{k}} - \frac{(\epsilon_H + \epsilon_F)}{2} \right]. \tag{A.64}$$

que representa el hamiltoniano de un gas de Fermi diagonal, en términos de cuasipartícula...

Los términos del hamiltoniano se pueden expresar en función de los parámetros $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_K &= \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) [2v_{\mathbf{k}} + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}})], \\
\hat{\mathcal{H}}_H &= \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (2v_{\mathbf{k}}^2) (2v_{\mathbf{k}'}^2) \\
\hat{\mathcal{H}}_F &= -\frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} [2v_{\mathbf{k}} + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) (\hat{m}_{\mathbf{k}} + \hat{m}_{-\mathbf{k}})], \\
\hat{\mathcal{H}}_p &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}'} - \hat{m}_{-\mathbf{k}'}) (1 - \hat{m}_{\mathbf{k}} - \hat{m}_{-\mathbf{k}}),
\end{aligned} \tag{A.65}$$

a temperatura cero ($T = 0$) se reducen a las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_K &= \sum_{\mathbf{k}} 2v_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu), \\
\hat{\mathcal{H}}_H &= \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (2v_{\mathbf{k}}^2) (2v_{\mathbf{k}'}^2) \\
\hat{\mathcal{H}}_F &= -\frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} 2v_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}, \\
\hat{\mathcal{H}}_p &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}
\end{aligned} \tag{A.66}$$

APÉNDICE B

Dimensiones de Fermi.

De acuerdo al límite termodinámico, para analizar las propiedades termodinámicas del gas de fermiones es necesario reemplazar la suma sobre los estados, en el espacio de momentos \mathbf{k} , a una integral de estados continuos. Por otra parte, para tratar numéricamente las diferentes ecuaciones, resultado del modelo teórico del sistema, es necesario adimensionar los diferentes parámetros que intervienen. Al tratarse de un gas de Fermi lo más natural es dimensionar las diferentes variables en unidades derivadas de la energía de Fermi de un gas ideal definida como:

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}, \quad \text{donde: } k_F^3 = 3\pi\rho \quad (\text{B.1})$$

siendo la densidad: $\rho = N/V$. Aquí hay un detalle muy importante a destacar, en la expresión de la energía de Fermi, m es la masa de las partículas (fermiones) que conforman al gas. Sin embargo en las expresiones que describen las propiedades de dispersión de pares de partículas, en especial la longitud de dispersión, se emplea la masa reducida del sistema de dos partículas que interactúan, en el caso de que ambas partículas tengan igual masa, la masa reducida es: $m_r = m/2$. Este factor de $1/2$ es de gran relevancia al hacer la correspondencia de las propiedades termodinámicas con la longitud de dispersión y en el capítulo 6 se discute a detalle esta correspondencia.

Consideremos de manera general que se tiene una función: $G(k, \theta_{\mathbf{k}}, \varphi_{\mathbf{k}})$, tal que se suma sobre los estados de momento \mathbf{k} , entonces en el límite termodinámico:

$$\sum_{\mathbf{k}} G(k, \theta_{\mathbf{k}}, \varphi_{\mathbf{k}}) \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int G(k, \theta_{\mathbf{k}}, \varphi_{\mathbf{k}}) d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\infty} G(k, \theta_{\mathbf{k}}, \varphi_{\mathbf{k}}) k^2 dk d\Omega_{\mathbf{k}}, \quad (\text{B.2})$$

donde la diferencial del ángulo sólido en coordenadas esféricas es: $d\Omega_{\mathbf{k}} = \sin\theta_{\mathbf{k}} d\theta_{\mathbf{k}} d\varphi_{\mathbf{k}}$. La

integral en k se puede dimensionar en términos de k_F de la siguiente manera:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} k^2 dk = \frac{V k_F^3}{(2\pi)^3} \tilde{k}^2 d\tilde{k}, \quad \text{donde: } \tilde{k} = k/k_F, \quad (\text{B.3})$$

suponiendo que no hay dependencia en el ángulo azimutal $\varphi_{\mathbf{k}}$ entonces:

$$\sum_{\mathbf{k}} G(k, \theta_{\mathbf{k}}, \varphi_{\mathbf{k}}) \rightarrow \frac{k_F^3}{4\pi^2} \frac{V}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty G(\tilde{k}, \theta_{\mathbf{k}}, \varphi_{\mathbf{k}}) \tilde{k}^2 d\tilde{k} \sin \theta_{\mathbf{k}} d\theta_{\mathbf{k}}. \quad (\text{B.4})$$

Por conveniencia, se hace el siguiente cambio de variable: $x = \tilde{k}^2$, esto es equivalente a pasar a la representación de la energía ($\epsilon \propto k^2$), de manera que: $\tilde{k}^2 d\tilde{k} = \sqrt{x}/2 dx$, y por lo tanto:

$$\sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}) \rightarrow \frac{k_F^3}{4\pi^2} \frac{V}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty G(x, \theta_{\mathbf{k}}) dx \sqrt{x} d\Omega_{\mathbf{k}}, \quad \begin{aligned} x &= \epsilon/\epsilon_F = k^2/k_F^2 \\ d\Omega_{\mathbf{k}} &= \sin \theta_{\mathbf{k}} d\theta_{\mathbf{k}} d\varphi_{\mathbf{k}} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

En el caso de las ecuaciones integrales (5.37), donde se define el gap, la energía de Hartree y la energía de Fock, el integrando tiene una dependencia del ángulo $\theta_{\mathbf{k}}$ y en este caso los ecuaciones en unidades de Fermi se expresan como:

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_H &= \frac{\tilde{U}_0}{3\pi^2} \\ \tilde{\epsilon}_F &= -\frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \frac{1}{2} \tilde{F}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R}) \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}}{\tilde{E}_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{2}\right) \right] \sqrt{x'} dx' \\ \tilde{\Delta}_x &= -\frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \tilde{F}(x, x', \tilde{V}_0, \tilde{R}) \frac{\tilde{\Delta}_{x'}}{2\tilde{E}_{x'}} \tanh\left(\frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{2}\right) \sqrt{x'} dx', \\ 1 &= \frac{3}{4} \int_0^\infty \left[1 - \frac{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta \mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{2}\right) \right] \sqrt{x'} dx'. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Si el integrando no depende del ángulo $\theta_{\mathbf{k}}$, como por ejemplos los términos del hamiltoniano, ver ecuación (5.41), lo conveniente es emplear la relación del momento de Fermi: $k_F^3 = 3\pi^2 N/V$ y por lo tanto:

$$\sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}) \rightarrow \frac{3}{4} N \int_0^\infty G(x) dx \sqrt{x}, \quad x = k^2/k_F^2 \quad (\text{B.7})$$

De esta manera, los términos del hamiltoniano, ecuación (5.41), en unidades de Fermi se expresan de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\mathcal{H}}_K \rangle &= \frac{3}{4} N \int_0^\infty (\tilde{x} - \tilde{\mu}) \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_x}{\tilde{E}_x} \tanh \left(\frac{\beta \mathcal{E}_x}{2} \right) \right] \sqrt{x} dx, \\
\langle \hat{\mathcal{H}}_H \rangle &= \frac{\tilde{\epsilon}_H}{2} N, \\
\langle \hat{\mathcal{H}}_F \rangle &= \frac{3}{8} N \int_0^\infty \tilde{\epsilon}_F(x) \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_x}{\tilde{E}_x} \tanh \left(\frac{\beta \mathcal{E}_x}{2} \right) \right] \sqrt{x} dx, \\
\langle \hat{\mathcal{H}}_p \rangle &= -\frac{3}{4} N \int_0^\infty \frac{\tilde{\Delta}_x^2}{2\tilde{E}_x} \tanh \left(\frac{\beta \mathcal{E}_x}{2} \right) \sqrt{x} dx.
\end{aligned} \tag{B.8}$$

La ecuación de número también es de este tipo y en unidades de Fermi se expresa como:

$$N = \frac{3}{4} N \int_0^\infty \left[1 - \frac{\mathcal{E}_k}{E_k} \tanh \left(\frac{\beta \mathcal{E}_k}{2} \right) \right] \sqrt{x'} dx'. \tag{B.9}$$

Para el caso de temperatura cero ($\tanh \left(\frac{\beta \mathcal{E}_x}{2} \right) = 1$) se reducen a las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\mathcal{H}}_K \rangle &= \frac{3}{4} N \int_0^\infty (\tilde{x} - \tilde{\mu}) \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_x}{\tilde{E}_x} \right] \sqrt{x} dx, \\
\langle \hat{\mathcal{H}}_H \rangle &= \frac{\tilde{\epsilon}_H}{2} N, \\
\langle \hat{\mathcal{H}}_F \rangle &= \frac{3}{8} N \int_0^\infty \tilde{\epsilon}_F(x) \left[1 - \frac{\tilde{\mathcal{E}}_x}{\tilde{E}_x} \right] \sqrt{x} dx, \\
\langle \hat{\mathcal{H}}_p \rangle &= -\frac{3}{4} N \int_0^\infty \frac{\tilde{\Delta}_x^2}{2\tilde{E}_x} \sqrt{x} dx. \\
1 &= \frac{3}{4} N \int_0^\infty \left[1 - \frac{\mathcal{E}_k}{E_k} \right] \sqrt{x'} dx'.
\end{aligned} \tag{B.10}$$

Bibliografía.

-
- [Afnan, 2011] Afnan, I. R. (2011). *Quantum Mechanics with Applications*. Bentham Science Publishers.
- [Alexander L. Fetter, 1971] Alexander L. Fetter, J. D. W. (1971). *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. McGraw-Hill.
- [Anderson et al., 1995] Anderson, M. H., Ensher, J. R., Matthews, M. R., Wieman, C. E., and Cornell, E. A. (1995). Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science*, 269(5221):198.
- [Bardeen et al., 1957] Bardeen, J., Cooper, L., and Schrieffer, J. (1957). Theory of superconductivity. *Physical Review*, 108(5):1175–1204.
- [Bartenstein et al., 2004] Bartenstein, M., Altmeyer, A., Riedl, S., Jochim, S., Chin, C., Denschlag, J. H., and Grimm, R. (2004). Crossover from a Molecular Bose-Einstein Condensate to a Degenerate Fermi Gas. *Physical Review Letters*, 92(12):120401–.
- [Bogolyubov, 1947] Bogolyubov, N. N. (1947). On the theory of superfluidity. *J. Phys.(USSR)*, 11:23–32. [Izv. Akad. Nauk Ser. Fiz.11,77(1947)].
- [Bourdel et al., 2004] Bourdel, T., Khaykovich, L., Cubizolles, J., Zhang, J., Chevy, F., Teichmann, M., Tarruell, L., Kokkelmans, S. J. J. M. F., and Salomon, C. (2004). Experimental Study of the BEC-BCS Crossover Region in Lithium 6. *Physical Review Letters*, 93(5):050401.
- [Braaten, 2009] Braaten, E. (2009). Viewpoint: How the tail wags the dog in ultracold atomic gases. *Physics*, 2:9.
- [Braaten, 2012] Braaten, E. (2012). *Universal Relations for fermions with Large Scattering Length*, pages 193–231. Springer Berlin Heidelberg.

- [Bradley et al., 1995] Bradley, C. C., Sackett, C. A., Tollett, J. J., and Hulet, R. G. (1995). Evidence of bose-einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. *Physical Review Letters*, 75(9):1687–1690.
- [Bruun et al., 1999] Bruun, G., Castin, Y., Dum, R., and Burnett, K. (1999). BCS theory for trapped ultracold fermions. *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, 7(3):433–439.
- [C. A. Reagal and Jin, 2004] C. A. Reagal, M. G. and Jin, D. S. (2004). Observation of resonance condensation of fermionic atoms pair. *Physical Review Letters*, 92(4):040403.
- [Caballero-Benítez et al., 2013] Caballero-Benítez, S. F., Paredes, R., and Romero-Rochín, V. (2013). The contact in the bcs-bec crossover for finite range interacting ultracold fermi gases. *Physics Letters A*, 377(28-30):1756–1759.
- [Chin et al., 2004] Chin, C., Bartenstein, M., Altmeyer, A., Riedl, S., Jochim, S., Denschlag, J., and Grimm, R. (2004). Observation of the pairing gap in a strongly interacting Fermi gas. *Science*, 305(5687):1128.
- [Chin et al., 2010] Chin, C., Grimm, R., Julienne, P., and Tiesinga, E. (2010). Feshbach resonances in ultracold gases. *Reviews of Modern Physics*, 82(2):1225–1286.
- [Christopher Pethick, 2008] Christopher Pethick, H. S. (2008). *Bose-Einstein condensation in dilute gases*. Cambridge University Press, 2a ed. edition.
- [Cooper, 1956] Cooper, L. N. (1956). Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Phys. Rev.*, 104(4):1189–1190.
- [Davis et al., 1995b] Davis, K. B., Mewes, M. O., Andrews, M. R., van Druten, N. J., Durfee, D. S., Kurn, D. M., and Ketterle, W. (1995b). Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, 75(22):3969–3973.
- [DeMarco and Jin, 1999] DeMarco, B. and Jin, D. S. (1999). Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas. *Science*, 285(5434):1703.
- [Demtroder, 2006] Demtroder, W. (2006). *Atoms, Molecules and Photons*. Springer-Verlag.
- [Duine and Stoof, 2004] Duine, R. and Stoof, H. (2004). Atom-molecule coherence in Bose gases. *Physics Reports*, 396(3):115–195.
- [Eagles, 1969] Eagles, D. (1969). Possible pairing without superconductivity at low carrier concentrations in bulk and thin-film superconducting semiconductors. *Physical Review*, 186(2):456–463.
- [Foot, 2005] Foot, C. J. (2005). *Atomic Physics*. Oxford University Press.
- [Greiner et al., 2003] Greiner, M., Regal, C., and Jin, D. (2003). Emergence of a molecular Bose Einstein condensate from a Fermi gas. *Nature*, 426(6966):537–540.

-
- [Hazlett et al., 2012] Hazlett, E. L., Zhang, Y., Stites, R. W., and O'Hara, K. M. (2012). Realization of a Resonant Fermi Gas with a Large Effective Range. *Phys. Rev. Lett.*, 108:045304.
- [Hu et al., 2007] Hu, H., Drummond, P. D., and Liu, X.-J. (2007). Universal thermodynamics of strongly interacting Fermi gases. *Nature Physics*, 3(7):469–472.
- [Huang and Yang, 1957] Huang, K. and Yang, C. N. (1957). Quantum Mechanical Many Body Problem with Hard-Sphere Interaction. *Phys. Rev.*, 105:767–775.
- [Inouye et al., 1998] Inouye, S., Andrews, M. R., Stenger, J., Miesner, H. J., Stamper-Kurn, D. M., and Ketterle, W. (1998). Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate. *Nature*, 392(6672):151–154.
- [Jensen et al., 2006] Jensen, L. M., Nilsen, H. M., and Watanabe, G. (2006). BCS-BEC crossover in atomic Fermi gases with a narrow resonance. *Phys. Rev. A*, 74:043608.
- [Kapitza, 1938] Kapitza, P. (1938). Viscosity of liquid helium below the λ -point. *Nature*, 141(3558):74–74.
- [Ketterle and Zwierlein, 2008] Ketterle, W. and Zwierlein, M. W. (2008). Making, probing and understanding ultracold Fermi gases. *Nuovo Cimento Rivista Serie*, 31:247–422.
- [Landau and Lifshitz, 1977] Landau, L. D. and Lifshitz, E. M. (1977). *Quantum Mechanics*, volume 3 of *Course of Theoretical Physics*. Pergamon Press, 3 edition.
- [Lee et al., 1957] Lee, T. D., Huang, K., and Yang, C. N. (1957). Eigenvalues and eigenfunctions of a bose system of hard spheres and its low-temperature properties. *Physical Review*, 106(6):1135–1145.
- [Leggett, 1980] Leggett, A. J. (1980). Diatomic Molecules and Cooper Pairs. *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter*, pages 13–27.
- [Leggett, 2004] Leggett, A. J. (2004). Nobel Lecture: Superfluid ^3He the early days as seen by a theorist. *Reviews of Modern Physics*, 76(3):999–1011.
- [Leggett, 2006] Leggett, A. J. (2006). *Quantum liquids: Bose condensation and Cooper Pairing in condensed-matter systems*. Oxford University Press, USA.
- [Loftus et al., 2002] Loftus, T., Regal, C. A., Ticknor, C., Bohn, J. L., and Jin, D. S. (2002). Resonant control of elastic collisions in an optically trapped fermi gas of atoms. *Physical Review Letters*, 88(17):173201.
- [Marini et al., 1998] Marini, M., Pistoiesi, F., and Strinati, G. C. (1998). Evolution from BCS superconductivity to Bose condensation: analytic results for the crossover in three dimensions. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 1(2):151–159.
- [Mendelssohn, 1965] Mendelssohn, K. (1965). *La busqueda del cero absoluto*. McGraw-Hill.

- [Merzbacher, 1998] Merzbacher, E. (1998). *Quantum Mechanics*. John Wiley, 3 edition.
- [Metcalf and van der Straten, 1999] Metcalf, H. J. and van der Straten, P. (1999). *Laser Cooling and Trapping*. Springer-Verlag, New York.
- [Moerdijk et al., 1995] Moerdijk, A. J., Verhaar, B. J., and Axelsson, A. (1995). Resonances in ultracold collisions of ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$, ${}^{23}\text{Na}$. *Physical Review A*, 51(6):4852–4861.
- [Nolting and Brewer, 2009] Nolting, W. and Brewer, W. D. (2009). *Fundamentals of Many-body Physics: Principles and Methods*. Springer Berlin Heidelberg.
- [Nozières and Schmitt-Rink, 1985] Nozières, P. and Schmitt-Rink, S. (1985). Bose condensation in an attractive fermion gas: From weak to strong coupling superconductivity. *J. Low Temp. Phys.*, 59(3/4):195–211.
- [O’Hara et al., 2002] O’Hara, K. M., Hemmer, S. L., Gehm, M. E., Granade, S. R., and Thomas, J. E. (2002). Observation of a Strongly Interacting Degenerate Fermi Gas of Atoms. *Science*, 298(5601):2179.
- [Olver et al., 2010] Olver, F. W. J., , Lozier, D. W., Boisvert, R. F., and Clark, C. W. (2010). *The NIST Handbook of Mathematical Functions*. Cambridge Univ. Press.
- [Parish, 2014] Parish, M. M. (2014). The bcs-bec crossover.
- [Parish, 2015] Parish, M. M. (2015). *The BCS-BEC Crossover*, pages 179–197. World Scientific Publishing Co.
- [Parish et al., 2005] Parish, M. M., Mihaila, B., Timmermans, E. M., Blagoev, K. B., and Littlewood, P. B. (2005). Bcs-bec crossover with a finite-range interaction. *Phys. Rev. B*, 71:064513.
- [Pathria, 1996] Pathria, R. K. (1996). *Statistical Mechanics*. Butterwoth-Heinemann, Oxford, 2a ed. edition.
- [Petrov et al., 2004] Petrov, D., Salomon, C., and Shlyapnikov, G. (2004). Weakly bound dimers of fermionic atoms. *Physical review letters*, 93(9):90404.
- [Philip L Taylor, 2002] Philip L Taylor, O. H. (2002). *A Quantum Approach to Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press.
- [Randeria et al., 2012a] Randeria, M., Zwerger, W., and Zwierlein, M. (2012a). The BCS-BEC crossover and the unitary fermi gas. *Lecture Notes in Physics*, 836:1–.
- [Rarita and Present, 1937] Rarita, W. and Present, R. D. (1937). On the nuclear two-, three- and four-body problems. *Physical Review*, 51(10):788–798.
- [Roberts et al., 1998] Roberts, J. L., Claussen, N. R., Burke, J. P., Greene, C. H., Cornell, E. A., and Wieman, C. E. (1998). Resonant Magnetic Field Control of Elastic Scattering in Cold ${}^{85}\text{Rb}$. *Physical Review Letters*, 81(23):5109–5112.

-
- [Roman, 1965] Roman, P. (1965). *Advanced Quantum Theory*. Addison Wesley, 1 edition.
- [Romero-Rochín, 2011] Romero-Rochín, V. (2011). Thermodynamic origin of the contact. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 44(9):095302.
- [Sá de Melo et al., 1993] Sá de Melo, C. A. R., Randeria, M., and Engelbrecht, J. R. (1993). Crossover from bcs to bose superconductivity: Transition temperature and time-dependent ginzburg-landau theory. *Physical Review Letters*, 71(19):3202–3205.
- [Sakurai, 1994] Sakurai, J. J. (1994). *Modern Quantum Mechanics*. Addison Wesley.
- [Sandoval-Figueroa and Romero-Rochín, 2008] Sandoval-Figueroa, N. and Romero-Rochín, V. (2008). Thermodynamics of trapped gases: Generalized mechanical variables, equation of state, and heat capacity. *Physical Review E*, 78(6):061129.
- [Schafroth MR, 1957] Schafroth MR, Butler ST, B. J. (1957). *Helv. Phys. Acta*, 30:93.
- [Schuck and Viñas, 2000] Schuck, P. and Viñas, X. (2000). Thomas-Fermi approximation for Bose-Einstein condensates in traps. *Physical Review A*, 61(4):043603–.
- [Tan, 2008a] Tan, S. (2008a). Energetics of a strongly correlated Fermi gas. *Annals of Physics*, 323:2952–2970.
- [Tan, 2008b] Tan, S. (2008b). Generalized virial theorem and pressure relation for a strongly correlated Fermi gas. *Annals of Physics*, 323:2987–2990.
- [Tan, 2008c] Tan, S. (2008c). Large momentum part of a strongly correlated Fermi gas. *Annals of Physics*, 323:2971–2986.
- [Zwierlein et al., 2005] Zwierlein, M. W., Abo-Shaeer, J. R., Schirotzek, A., Schunck, C. H., and Ketterle, W. (2005). Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas. *Nature*, 435(7045):1047–1051.
- [Zwierlein et al., 2003] Zwierlein, M. W., Stan, C. A., Schunck, C. H., Raupach, S. M. F., Gupta, S., Hadzibabic, Z., and Ketterle, W. (2003). Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules. *Physical Review Letters*, 91(25):250401–.
- [Zwierlein et al., 2004] Zwierlein, M. W., Stan, C. A., Schunck, C. H., Raupach, S. M. F., Kerman, A. J., and Ketterle, W. (2004). Condensation of Pairs of Fermionic Atoms near a Feshbach Resonance. *Physical Review Letters*, 92(12):120403–.

PAPER

Pairing and molecule formation along the BCS-BEC crossover for finite range potentials

To cite this article: E Neri *et al* 2020 *Phys. Scr.* **95** 034013

View the [article online](#) for updates and enhancements.

Pairing and molecule formation along the BCS-BEC crossover for finite range potentials

E Neri, S F Caballero-Benítez , V Romero-Rochín  and R Paredes 

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 20-364, México D. F. 01000, México

E-mail: rosario@fisica.unam.mx

Received 3 September 2019, revised 5 November 2019

Accepted for publication 12 November 2019

Published 10 February 2020



CrossMark

Abstract

We address the thermodynamics of the zero temperature BCS-BEC crossover of a balanced two component mixture of a finite range interacting fermions within a mean field approach. For the analysis we consider two wide types of finite range potentials describing the interaction between different Fermi species: purely attractive, as the square well, the exponential and the Yukawa potentials, and others having both a repulsive wall at the origin as well as a finite attractive tail, as Van der Waals and dipolar potentials. We study the energy gap, the chemical potential and the pressure as functions of the scattering length for all the interacting potentials considered. The system spatial structure is further analyzed via the the pair functions associated to each potential. We find that for those with pure attractive contributions the crossover can be recognized either, when the chemical potential changes its sign or when the scattering length diverges. In contrast, the pair functions linked to potentials with both repulsive and attractive terms, show wide crossover regions without sharp distinctions at the sign change of the chemical potential nor at unitarity.

Keywords: BCS-BEC crossover, interacting Fermi gases, ultracold atoms

(Some figures may appear in colour only in the online journal)

1. Introduction

The observation in 2004 of the transition from the atomic Bardeen–Cooper–Schrieffer state to the molecular Bose–Einstein condensate, known as the BCS-BEC crossover [1–5], confirmed the early prediction [6–12] that these two different states, in principle opposite in nature, emerge from the same origin, namely, from an interacting gas composed of a balanced mixture of Fermi atoms in two different hyperfine states. Even more, those experiments established that the crossover occurs due to the presence of a Feshbach resonance in very low energy two-body collisions. Recently, exotic phases of quantum matter exhibiting this smooth transition have been investigated in nuclear matter [13], color superfluidity [14] and FFLO states [15] among an extensive amount of possible scenarios. Moreover, there have been experiments of quantum simulation with ultracold quantum

matter exploring vortex dynamics [16] and transport properties [17–19], which have allowed to study physical phenomena in the parameter regime of the crossover.

Based on the facts that, on the one side, the mean-field approach provides an intuitive and qualitatively reasonable description of the BCS-BEC crossover, and on the other, the two-channel Feshbach resonances used in real experiments can be replaced by a single-channel potential resonance, we investigate in this work the physics of the crossover for different finite range interaction potentials. In addition, we track the form of the pair functions along the whole crossover, as a function of the parameters that define the model potential. We recall that, typically, the BCS-BEC crossover is studied by using the so-called contact approximation [8], in which the finite range interaction potential is replaced by a Dirac delta potential proportional to the (positive) two-body collision scattering length. Since actual potentials are finite range, and

do not depend explicitly on the scattering length, there has already been interest in analyzing the crossover and its properties taking those aspects into account. In our study we shall consider two different classes of potentials modeling the interaction between fermions; potentials having just an attractive contribution, and potentials with both, a repulsive wall at the origin and the usual attractive part at finite distances. The usefulness of including this last type of interacting potentials is that in principle they could capture in a more realistic way the essence of atomic collisions, that is, not just the attractive contribution responsible of the pair formation in both, BEC and BCS states, but the repulsive part representing the nuclei core.

Previous analysis of the $T=0$ BCS-BEC problem considering finite range potentials include both homogeneous and inhomogeneous cases and are based on Quantum Monte Carlo approaches [20–22], as well as on numerical solutions of the coupled equations of the BCS theory [23, 24]. Here we show that the structure of the coupled equations for the energy gap and the density leads us to identify closed expressions for any finite range potential model with definite Fourier transform, thus, providing a route to address a variety of the physics of the crossover. According to the universality hypothesis [25], in the limit when the scattering length diverges and therefore the system loses its atomic length-scale, it is expected that all thermodynamic quantities become independent on any atomic length, including the characteristic range defining the interaction potential. At the same time the so called unitarity regime, namely the strongly interacting regime near the resonance, marks the separation of the physically quite different BCS and BEC limits. Since all the above interatomic potentials depend on two parameters, namely, its energy depth and its spatial range, and none of these diverge at unitarity, one should not expect an absolute universality even at the resonance. However, as we shall see, the present investigation indicates that, while universality is restored in the limit of very diluted gases, it also suggests that a more appropriate variable to define unitarity is a dimensionless quantity that depends on the two parameters of the potential, since such a variable appears explicitly in all thermodynamic variables. The present investigation also brings new insights into the pairing phenomenon that allows us to explore the physics of very diverse systems, such as gases of cold atoms in optical cavities where tunable range effective atomic interactions can be engineered [26–29], or systems belonging to the context of high energy physics as the relativistic description of BCS-BEC crossover in nuclear matter [30–32].

This manuscript is organized in 5 sections. In section 2 we write the BCS mean field equations that describe the $T=0$ ground state of the interacting Fermi mixture for the finite range potentials here analyzed. In section 3 we present the thermodynamics along the BCS-BEC crossover as a function of both, the s -wave scattering length and the parameters R and V_0 associated to the range and depth of the model potential. In section 4 the analysis of the pair functions is presented. Finally a discussion and a summary of this work is presented in section 5.

2. BCS theory for finite range potentials

The most general Hamiltonian describing a balanced two component mixture of Fermi atoms with pairwise interactions, in the grand canonical ensemble is,

$$H - \mu N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{K}; \sigma, \sigma'} U_{\mathbf{K}\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}', \sigma'}, \quad (1)$$

with $\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$, m being the atom mass, $\mathbf{K} = \{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}\}$ and $\hat{n}_{\mathbf{k}, \sigma} = \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}$ the number operator written in terms of the creation and annihilation Fermi operators $\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger$ and $\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}$ respectively. σ labels two different hyperfine spin states that we shall denote as \uparrow and \downarrow . $U_{\mathbf{K}\mathbf{k}'}$ is the Fourier transform of the finite range potential that models the inter particle interaction $U_{\mathbf{K}\mathbf{k}'} = \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} U(r) d^3r$. As it is well known, consideration of momentum conservation leads us to recognize three different terms associated to the interaction between pairs, they are,

$$H_H = \frac{U_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}), \quad (2)$$

$$H_F = -\frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{K}\mathbf{k}'} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}'\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} \hat{n}_{\mathbf{k}'\downarrow}), \quad (3)$$

$$H_p = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} U_{\mathbf{K}\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}, \quad (4)$$

where $U_0 = U_{\mathbf{K}\mathbf{k}'}$ with $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = 0$, that is, the Fourier transform of the zero exchange momenta. In the standard BCS-BEC crossover theory, the term of pairs H_p is the responsible of the pairing phenomenon, while the terms associated to Hartree H_H and Fock H_F contributions are typically neglected. Strictly speaking, in the case of the contact potential approximation, the terms H_H and H_F show a divergence when the s -wave scattering length diverges. As it is well known, such a divergence is an artifact associated to the contact approximation itself. As previously shown in the literature, those divergences do not appear for finite range potentials [24]. In fact, for the finite range potentials here analyzed, the contributions H_H and Fock H_F do not exhibit any anomalous behavior along the BCS-BEC crossover. Following the formulation made by Leggett [8], we shall neglect in our work these terms representing just an energy shift. Thus, after substituting the BCS ansatz for the many-body ground state wavefunction, $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle$, and performing the standard variational procedure, one obtains the grand potential function $\Omega = \langle \Psi_{\text{BCS}} | H - \mu N | \Psi_{\text{BCS}} \rangle$,

$$\Omega = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_{\mathbf{K}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}}, \quad (5)$$

where $2u_{\mathbf{k}}^2 = 1 + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/E_{\mathbf{k}}$ and $2v_{\mathbf{k}}^2 = 1 - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/E_{\mathbf{k}}$, with $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$, thus defining the \mathbf{k} -dependent energy gap $\Delta_{\mathbf{k}}$. The grand potential Ω is minimized when the energy gap and the chemical potential μ satisfy the coupled equations,

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} ,$$

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad (6)$$

where N is the total number of atoms. In the thermodynamic limit, these coupled equation (6) can be expressed in a general form for an arbitrary central potential $U(r)$ as,

$$\tilde{\Delta}_x = -\frac{1}{16\pi^3} \int_0^\infty \tilde{F}(x, x') \frac{\tilde{\Delta}_{x'}}{2\tilde{E}_{x'}} \sqrt{x'} dx',$$

$$1 = \frac{3}{4} \int_0^\infty \left(1 - \frac{x - \tilde{\mu}}{\tilde{E}_x} \right) \sqrt{x} dx, \quad (7)$$

where the energies have been scaled with respect to the Fermi energy $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$, with $k_F = (3\pi^2 N/V)^{1/3}$ the Fermi wave vector, and $x = k^2/k_F^2$ is a dimensionless variable. Here and henceforth tilde refers to dimensionless variables. The function $\tilde{F}(x, x')$, namely, the kernel of the energy gap equation, depends on the specific form of the potential that models the interaction $U(r)$. Written in spherical coordinates this function adopts the form: $\tilde{F}(x, x') = \int \tilde{U}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sin\theta d\theta d\phi$. One can find a simplified expression for $\tilde{F}(x, x')$ for an arbitrary spherical potential of the form $U(|\mathbf{r}|) = V_0 u(r/R)$, where V_0 and R are the potential depth and the spatial range respectively, and $u(r/R)$ a dimensionless function that depends on the ratio r/R . The final form for $\tilde{F}(x, x')$ is:

$$\tilde{F}(x, x, \tilde{R}, \tilde{V}_0) = -\frac{8\pi^2 \tilde{V}_0}{\sqrt{x x'}} \int_0^\infty u(\tilde{r}/\tilde{R}) [\cos(y_2) - \cos(y_1)] d\tilde{r}, \quad (8)$$

where $y_1 = \tilde{r}|\sqrt{x} - \sqrt{x'}|$ and $y_2 = \tilde{r}|\sqrt{x} + \sqrt{x'}|$. In this manuscript we shall consider two types of potentials modeling the interparticle interactions; potentials purely attractive as the square well, the exponential, and the Yukawa potentials, and potentials having both, a repulsive wall at the origin plus the standard attractive tail starting from a finite range distance as the dipolar and the Van der Waals potentials. The explicit expressions that we shall consider are,

$$U_{\text{sw}}(r) = \begin{cases} -V_0 & r \leq R \\ 0 & r \geq R \end{cases}$$

$$U_{\text{exp}}(r) = -V_0 e^{-r/R},$$

$$U_{\text{Yuk}}(r) = -V_0 \frac{R}{r} e^{-r/R},$$

$$U_{\text{dip}}(r) = \begin{cases} V_b & r \leq R \\ -V_0 \frac{R^3}{r^3} & r \geq R \end{cases}$$

$$U_{\text{vdw}}(r) = \begin{cases} V_b & r \leq R \\ -V_0 \frac{R^6}{r^6} & r \geq R \end{cases} \quad (9)$$

where V_b is the amplitude of the barrier at the origin in the case of the dipolar and the Van der Waals potentials. In our work we shall consider two different values of V_b to analyze the physics along the BCS-BEC crossover. These values are $V_b = 0$ and V_0 . A natural dimensionless quantity that characterizes these potentials is $\chi = (2mR^2V_0/\hbar^2)^{1/2}$. As we will

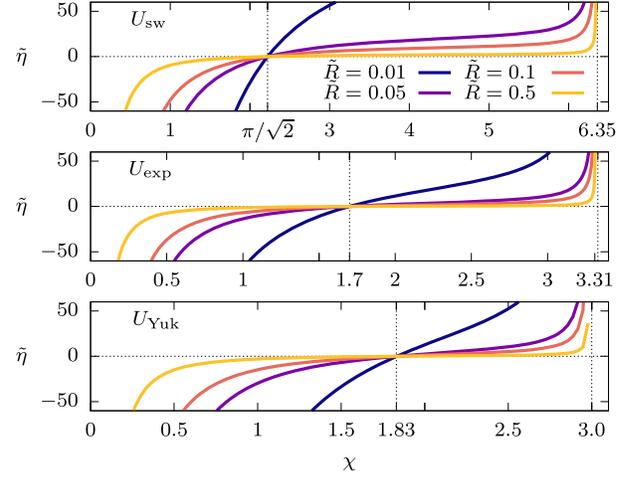


Figure 1. Inverse of the s -wave scattering length $\tilde{\eta} = 1/k_F a$ as a function of the variable $\chi = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$, for the square well $U_{\text{sw}}(r)$, exponential $U_{\text{exp}}(r)$, and Yukawa potentials $U_{\text{Yuk}}(r)$, equation (9). Different curves in each panel correspond to different values of potential range R . The vertical dashed line indicates the value of χ for which the s -wave scattering length diverges in each case.

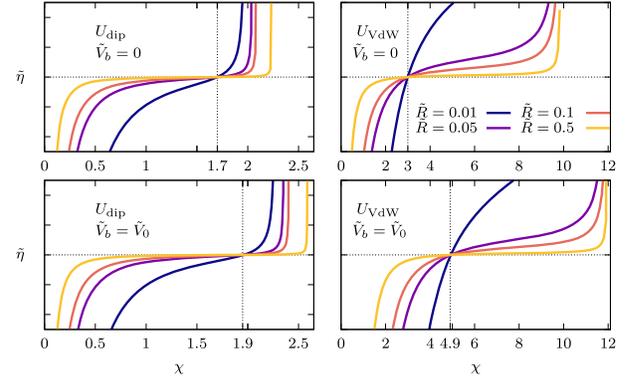


Figure 2. Inverse of the s -wave scattering length $\tilde{\eta} = 1/k_F a$ as a function of the variable $\chi = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$, for the Van der Waals $U_{\text{vdw}}(r)$ and dipolar $U_{\text{dip}}(r)$ potentials, equation (9). Different curves in each panel correspond to different values of potential range R . The vertical dashed line indicates the value of χ for which the s -wave scattering length diverges in each case.

see below, this quantity and the scaled potential range $\tilde{R} = k_F R$ are very appropriate to describe the overall role of the finite range potential, since the first one determines the relative values of V_0 and R at the resonance, and the second one yields the degree of diluteness of the gas; we will be mainly interested in the case $\tilde{R} \ll 1$.

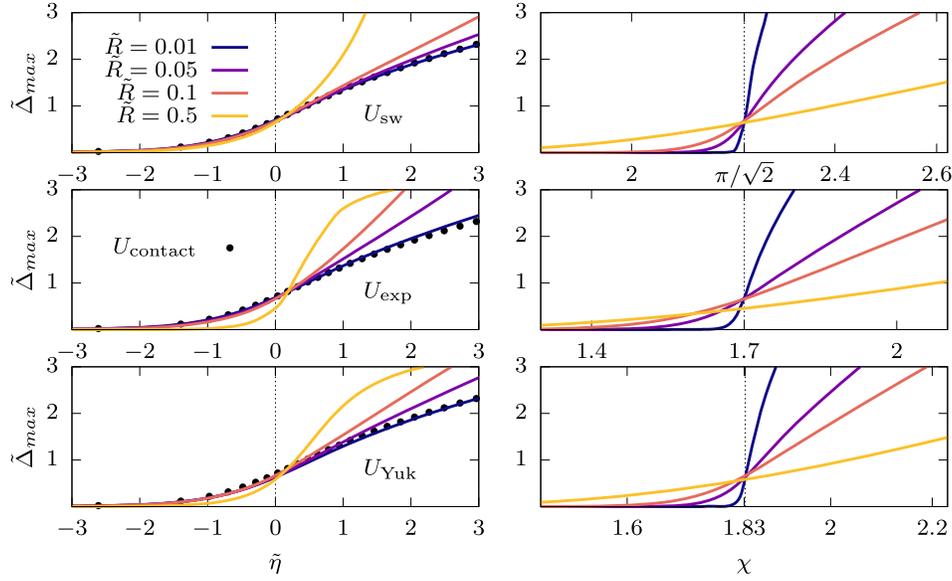


Figure 3. Dimensionless energy gap (maximum) $\tilde{\Delta}_{\max}$ as a function of the inverse of the s -wave scattering length $\tilde{\eta}$ (left panels) and the dimensionless variable χ (right panels), for the square well U_{sw} , exponential U_{exp} , and Yukawa potentials U_{Yuk} . The dotted line in the left panels is the contact approximation result. Different curves in each panel correspond to different values of the potential range \tilde{R} . The vertical dotted line in the right panels indicate the values of χ at resonance for the different potentials.

The function \tilde{F} for these potentials is given by,

$$\begin{aligned}
 \tilde{F}_{\text{sw}}(x, x') &= \frac{8\pi^2 \tilde{V}_0 \tilde{R}}{\sqrt{xx'}} \left(\frac{\sin Y_2}{Y_2} - \frac{\sin Y_1}{Y_1} \right), \\
 \tilde{F}_{\text{exp}}(x, x') &= \frac{8\pi^2 \tilde{V}_0 \tilde{R}}{\sqrt{xx'}} \left(\frac{1}{1 + Y_2^2} - \frac{1}{1 + Y_1^2} \right), \\
 \tilde{F}_{\text{Yuk}}(x, x') &= \frac{8\pi^2 \tilde{V}_0 \tilde{R}}{\sqrt{xx'}} \ln \left(\frac{1 + Y_2^2}{1 + Y_1^2} \right)^{1/2}, \\
 \tilde{F}_{\text{dip}}(x, x') &= -\tilde{F}_{\text{sw}}(x, x') + \frac{8\pi^2 \tilde{V}_0 \tilde{R}}{2\sqrt{xx'}} \{ \cos Y_2 - \cos Y_1 \\
 &+ Y_1 \sin Y_1 - Y_2 \sin Y_2 + Y_2^2 \text{Ci}(Y_2) - Y_1^2 \text{Ci}(Y_1) \} \\
 \tilde{F}_{\text{vdw}}(x, x') &= -\tilde{F}_{\text{sw}}(x, x') + \frac{8\pi^2 \tilde{V}_0 \tilde{R}}{\sqrt{xx'}} \\
 &\times \left\{ \left[\left(\frac{1}{5} - \frac{Y_2^2}{60} + \frac{Y_2^4}{120} \right) \cos(Y_2) + \left(-\frac{Y_2}{20} + \frac{Y_2^3}{120} \right) \sin Y_2 \right. \right. \\
 &- \left. \left. \frac{Y_2^5}{120} \left[\frac{\pi}{2} - \text{Si}(Y_2) \right] \right] \right. \\
 &- \left[\left(\frac{1}{5} - \frac{Y_1^2}{60} + \frac{Y_1^4}{120} \right) \cos(Y_1) + \left(-\frac{Y_1}{20} + \frac{Y_1^3}{120} \right) \sin Y_1 \right. \\
 &- \left. \left. \frac{Y_1^5}{120} \left[\frac{\pi}{2} - \text{Si}(Y_1) \right] \right] \right\}, \tag{10}
 \end{aligned}$$

where now $Y_1 = \tilde{R}|\sqrt{x} - \sqrt{x'}|$ and $Y_2 = \tilde{R}|\sqrt{x} + \sqrt{x'}|$.

Solution of the coupled system (7) gives the full information of the crossover for the studied interacting potentials. As we shall see in the next section, this coupled system will be solved for a fixed density N/V and the parameters that

define the two-body interaction V_0 and R . Here we want to stress two different aspects exhibited by finite range potentials, with respect to its counterpart, the contact interaction case. The first one is that the energy gap $\tilde{\Delta}_x$ is not a constant quantity as in the standard BCS theory, instead, it is a function of the momentum \mathbf{k} . The second aspect to be emphasized is that, as a consequence of having a potential depending on the range R , it is expected that the physical properties capture such a dependency. In other words, one should expect that besides the natural Fermi length $1/k_F$ present in the usual contact interaction potential, the presence of the additional length become noticeable through the whole BCS-BEC crossover.

A technical but relevant observation that should be pointed out is that, in addition for the interatomic potential to exhibit a potential resonance, thus signaling the emergence of a bound state, the interatomic potential should preferably have an analytic Fourier transform, otherwise the numerical calculations can become prohibitively expensive and inaccurate. Certainly, the necessity of an analytic expression for the s -wave scattering length in terms of the parameters V_0 and R is not an essential requirement, and to the best of our knowledge, just few potentials have analytic expressions for the s -wave scattering length. As a matter of fact, for the model potentials here analyzed only two of them have such a relationship; the other can be found numerically. This is discussed in the following section.

2.1. s -wave scattering length

In this subsection we present the results of the s -wave scattering length for the interacting potentials of our study, equation (9), $U_{\text{sw}}(r)$, $U_{\text{exp}}(r)$, $U_{\text{Yuk}}(r)$, $U_{\text{dip}}(r)$ and $U_{\text{vdw}}(r)$.

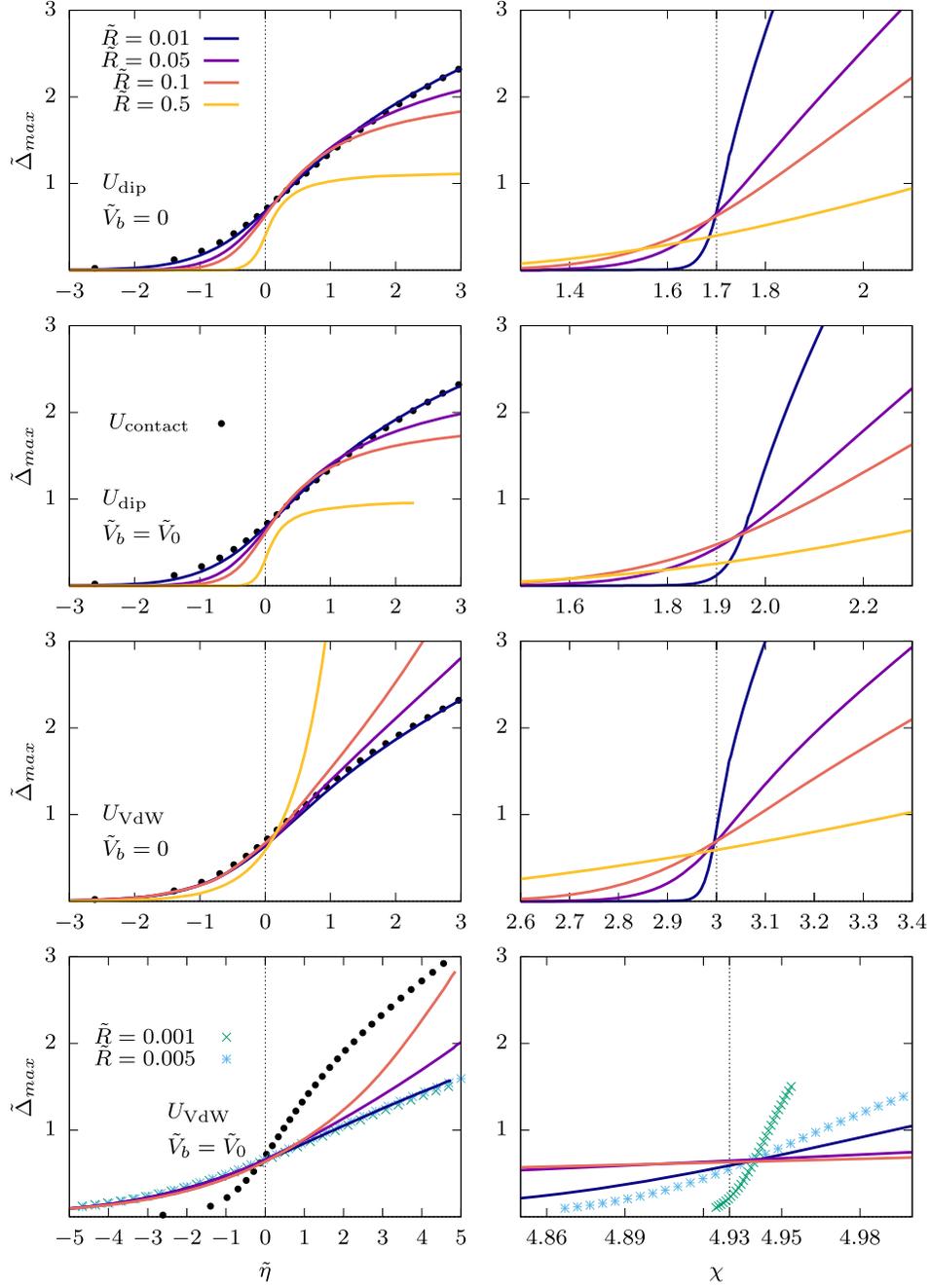


Figure 4. Dimensionless energy gap (maximum) $\tilde{\Delta}_{\max}$ as a function of the inverse of the s -wave scattering length $\tilde{\eta}$ (left panels) and the dimensionless variable χ (right panels), for the Van der Waals U_{VdW} , and dipolar potentials U_{dip} . The dotted line in the left panels is the contact approximation result. Different curves in each panel correspond to different values of the potential range \tilde{R} , green and blue symbols correspond to $\tilde{R} = 0.001$ and 0.005 respectively. The vertical dotted line in the right panels indicate the values of χ at resonance for the different potentials.

As it is known, while the square well and exponential potentials have an explicit relationship for the s -wave scattering length a in terms of the parameters V_0 and R [33, 34], the Yukawa, the Van der Waals and the dipolar potentials do not.

The expressions for a associated to each potential are,

$$\tilde{a}_{\text{sw}}(\chi) = \tilde{R} \left[1 - \frac{\tan(\chi/\sqrt{2})}{\chi/\sqrt{2}} \right],$$

$$\tilde{a}_{\text{exp}}(\chi) = -2\tilde{R} \left[\frac{\pi N_0(\sqrt{2}\chi)}{2 J_0(\sqrt{2}\chi)} - \ln\left(\frac{\chi}{\sqrt{2}}\right) - \gamma \right],$$

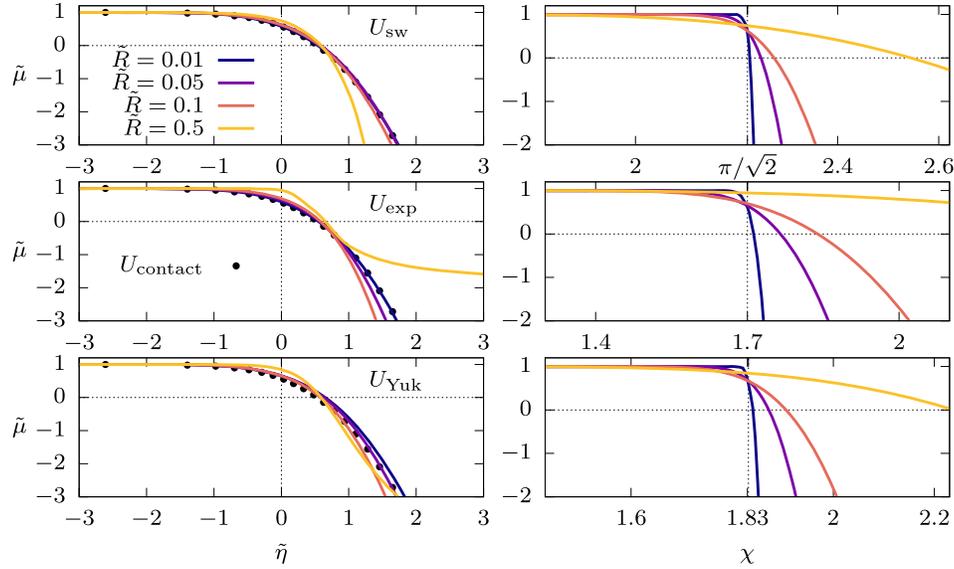


Figure 5. Dimensionless chemical potential $\tilde{\mu}$ as a function of the inverse of the s -wave scattering length $\tilde{\eta}$ (left panels) and the dimensionless variable χ (right panels), for the square well U_{sw} , exponential U_{exp} , and Yukawa potentials U_{Yuk} . The dotted line in the left panels is the contact approximation result. Different curves in each panel correspond to different values of the potential range \tilde{R} . The vertical dotted line in the right panels indicate the values of χ at resonance for the different potentials.

where γ is the Euler–Mascheroni constant, and $J_0(x)$ and $N_0(x)$ are zero order Bessel functions of first and second kind. These expressions for the s -wave have been written in its dimensionless form. In particular, the dimensionless parameter χ can also be expressed in terms of reduced quantities as $\chi = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$. The scattering length for the Yukawa potential can be obtained numerically by solving the appropriate two-body problem, see [35]. In figure 1 we plot the inverse of the dimensionless s -wave scattering length $\tilde{\eta} = 1/k_F a$ as a function of χ for several values of the range \tilde{R} along the first potential resonance, for the three potentials considered. As one can see from this figure, for a given potential, the emergence of a bound state occurs at a fixed value of the variable χ , which is where all the curves coalesce, regardless of the value \tilde{R} . In other words, at resonance, there is a unique or universal value of χ . For the potentials having just the attractive part, these values are $\chi = \pi/\sqrt{2}$, 1.7 and 1.83, for the square well, exponential and Yukawa potentials, respectively. In the case of potentials having both, the repulsive and the attractive contributions, the universal value of χ , disregarding the size of the range \tilde{R} , depends on the value of the barrier height that defines each potential. As described above, in this analysis we consider two cases for the height of the barrier V_b , $V_b = 0$ and $V_b = V_0$. As can be seen from figure 2, the effect of changing the amplitude of the barrier leads to an effective shift of the value χ .

According to the universal hypothesis at unitarity, which is when the s -wave scattering length of the two-body problem diverges, the thermodynamics of the gas becomes independent on the specific details of the two body interaction. Thus presumably, one should expect that differences of the physical properties become absent at least at $\tilde{\eta} = 0$. As we will see this is not quite true for arbitrary values of \tilde{R} , however, as

$\tilde{R} \rightarrow 0$, namely, in the very dilute limit where the theory is ultimately expected to be valid, unitarity is restored.

3. $T = 0$ thermodynamics in the BCS-BEC crossover

In this section we analyze the thermodynamics along the crossover for the model potentials described in equation (9). In particular, we concentrate in determining the chemical potential $\tilde{\mu}$, the pressure \tilde{p} and the energy gap $\tilde{\Delta}_k$, as functions of the parameters \tilde{R} and \tilde{V}_0 . $\tilde{\Delta}_k$ and $\tilde{\mu}$ were directly obtained by numerically solving the coupled system (7), while the pressure \tilde{p} was obtained from the grand potential function, recalling that $\Omega = -pV$, with V the volume of the sample, see equation (5). We show the behavior of these properties in panels associated to the cases here considered. Namely, purely attractive potentials as U_{sw} , U_{exp} and U_{Yuk} expressions; and potentials having both, the repulsive and the attractive contributions as U_{Vdw} and U_{dip} potentials. In figures 3–8 we plot the quantities $\tilde{\Delta}_k$, $\tilde{\mu}$ and \tilde{p} , as a function of both, the inverse of the s -wave scattering length $\tilde{\eta}$ (panels on the left), and the variable χ (panels on the right) for each interatomic potential. As indicated in the figures, we illustrate the behavior of those thermodynamic quantities for several values of the potential range $\tilde{R} = 0.01, 0.05, 0.1$ and 0.5 . We must point out here that in the case of the Van der Waals interaction U_{Vdw} , besides these values of \tilde{R} , we also analyzed the thermodynamics associated to $\tilde{R} = 0.001$ and $\tilde{R} = 0.005$. The dotted black curves in all the panels on the left correspond to the contact interaction potential [8].

Several observations regarding the behavior of the thermodynamic quantities $\tilde{\Delta}_{max}$, $\tilde{\mu}$ and \tilde{p} follow from their corresponding figures. First, by looking at the left panels,

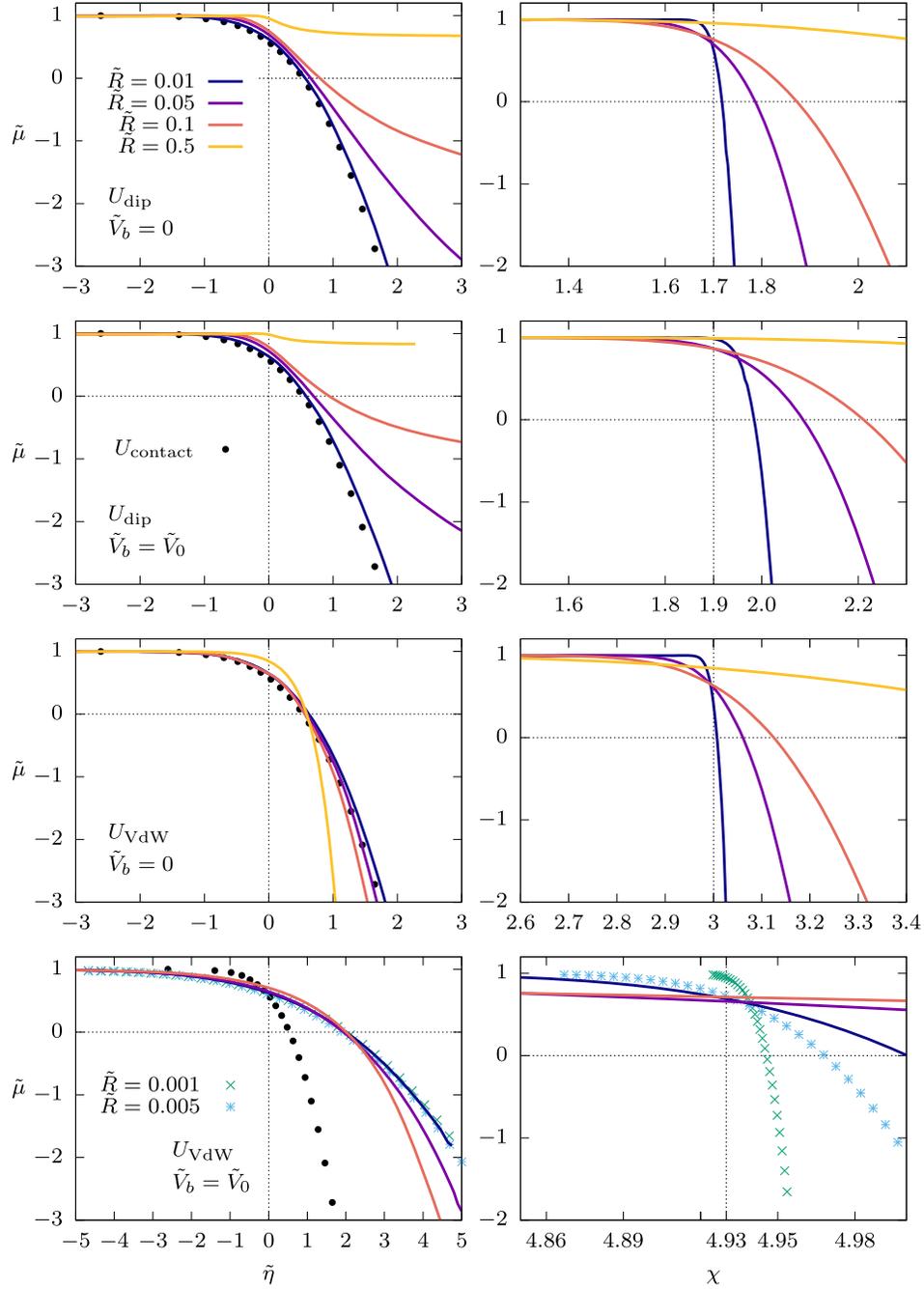


Figure 6. Dimensionless chemical potential $\tilde{\mu}$ as a function of the inverse of the s -wave scattering length $\tilde{\eta}$ (left panels) and the dimensionless variable χ (right panels), for the for the Van der Waals U_{VdW} , and dipolar potentials U_{dip} . The dotted line in the left panels is the contact approximation result. Different curves in each panel correspond to different values of the potential range \tilde{R} , green and blue symbols correspond to $\tilde{R} = 0.001$ and 0.005 respectively. The vertical dotted line in the right panels indicate the values of χ at resonance for the different potentials.

where the thermodynamic variables are expressed as a function of $\tilde{\eta}$, one finds that for the smallest values of \tilde{R} considered, namely $\tilde{R} = 0.01$ and $\tilde{R} = 0.001$, the standard result of the contact potential at $\tilde{\eta} = 0$, is recovered for all thermodynamic quantities and for all potentials. As \tilde{R} is increased, while in the the BCS regime, $\tilde{\eta} < 0$, the agreement with the contact approximation remains, it is not true for the

BEC side, $\tilde{\eta} > 0$. We point out here that we have included the case $\tilde{R} = 0.5$, which is not very realistic since it corresponds to a very dense gas with an interatomic range nearly half of the mean interparticle separation, to make evident that significant deviations occur from the dilute case, estimated as initiating in $\tilde{R} \approx 0.1$. It is important to notice that in the case of the Van der Waals interaction, associated to $V_{\text{b}} = V_0$, a

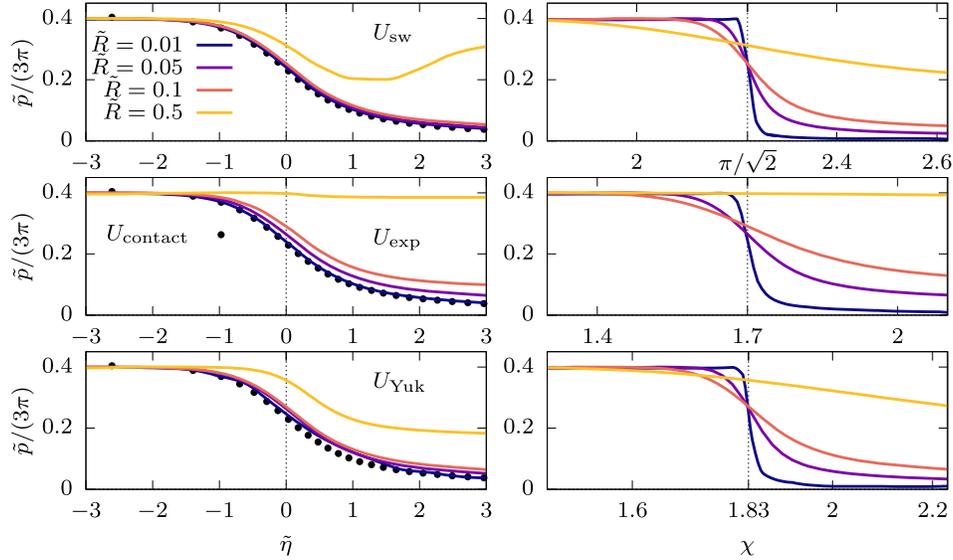


Figure 7. Dimensionless pressure \bar{p} as a function of the inverse of the s -wave scattering length $\tilde{\eta}$ (left panels) and the dimensionless variable χ (right panels), for the square well U_{sw} , exponential U_{exp} , and Yukawa potentials U_{Yuk} . The dotted line in the left panels is the contact approximation result. Different curves in each panel correspond to different values of the potential range \tilde{R} . The vertical dotted line in the right panels indicate the values of χ at resonance for the different potentials.

contrasting behavior with respect to the other cases occurs as $\tilde{R} \rightarrow 0$; the curves deviate from the contact result. A very important question concerns the validity of the universality hypothesis [25] at resonance, or unitarity, $\tilde{\eta} = 0$, which states that thermodynamic variables take on universal values at such a point. Although in the left panels one can assess whether the hypothesis holds or not, we find that the panels on the right, expressed in terms of the dimensionless variable χ , on which the thermodynamic variables explicitly depend, its elucidation is certainly much clearer. That is, in agreement with the results shown of figure 1, one should expect to find that at resonance, for a given model of interaction, all the observables should show a similar behavior at the resonance value of χ . Indeed, we observe that, although universality strictly speaking does not hold, as evidently specified by the case $\tilde{R} = 0.5$, it is restored as the gas becomes more diluted, namely, as $\tilde{R} \rightarrow 0$, independently of the potential. As one can see from the figures, the exponential potential shows a slight disagreement for $\tilde{R} = 0.05$ and 0.1 , but as the others, for $\tilde{R} = 0.01$, universality holds. These results certainly validate the bounds of the universality of thermodynamics at resonance. We return to this point in the final section of this work. The further gain in using the variable χ , for finite range interactions, is that as the BEC side is entered, the differences in the thermodynamic variables are clearly shown even for very small values of the range \tilde{R} .

4. Bound molecules and Cooper pairs for finite range potentials

One of the most remarkable signatures that have allowed to track the reversible smooth transition from the BCS superfluid to a BEC state in ultracold atomic experiments, is the

presence of weakly-bound Cooper pairs and strongly-bound molecular dimers respectively. In the laboratory these pairs are usually created by means of a magnetically tunable resonance and have a definite and controllable binding energy. Spectroscopic measurements of the pairing energy have confirmed the crossover from a two-body molecular pairing regime to the many body dominated BCS regime [36–38]. In this work we also address the BCS-BEC crossover by analyzing the nature of the pair functions in the whole range of the s -wave scattering length, including values of the scattering length well above the resonance, $a \rightarrow \pm\infty$. As shown in [39], the pair wavefunctions can be determined from the Fourier transform of the expectation value of the creation pair operator $\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$, yielding,

$$\psi(r) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (11)$$

with the product $u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}}/2E_{\mathbf{k}}$. The pair functions $\psi(r)$ can be shown to be real.

In figures 9 and 10 we plot the pair functions in a density-plot style to properly appreciate the behavior in the BCS and BEC regimes. These functions are normalized to their maximum value. Yellow and purple colors correspond to the largest and to the shortest amplitudes, $\tilde{\psi} = 1$ and $\tilde{\psi} = -1$ respectively. Panels on the left and right correspond to the potential ranges extremes analyzed, $\tilde{R} = 0.05$ and $\tilde{R} = 0.5$. In figure 10, right panel on the bottom corresponds to $\tilde{R} = 0.1$. The continuous and dashed lines indicate the states $\tilde{\mu} = 0$ and $\tilde{\eta} = 0$, respectively. As one sees from figure 9, the BCS and BEC regimes, characterized by oscillatory and exponentially localized forms typical of Cooper pairs and bound states respectively, are clearly recognized by either, when the chemical potential changes its sign or when the scattering length diverges; that is, at $\tilde{\mu} = 0$ and $\tilde{\eta} = 0$ respectively. Also, from

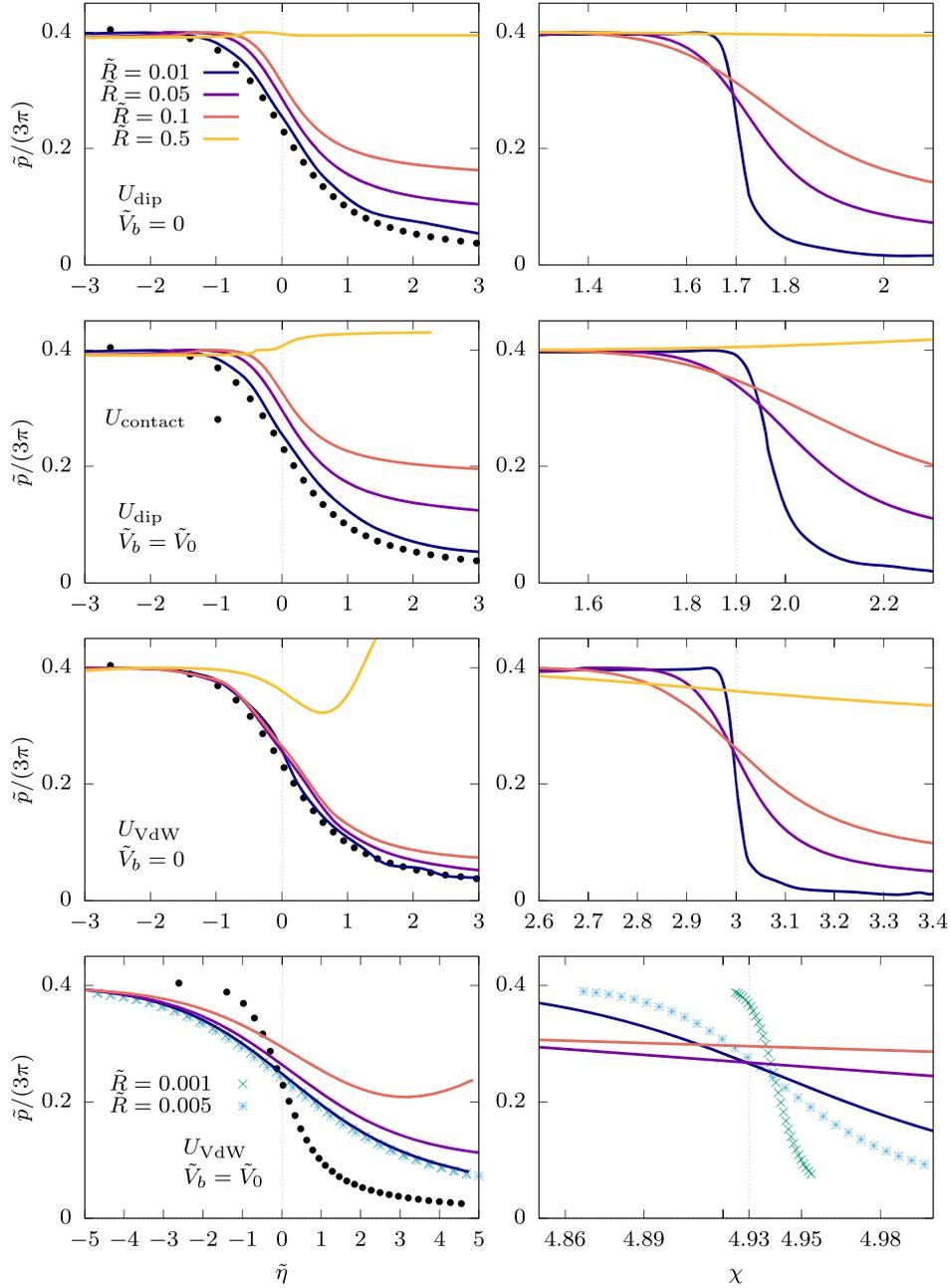


Figure 8. Dimensionless pressure \bar{p} as a function of the inverse of the s -wave scattering length $\tilde{\eta}$ (left panels) and the dimensionless variable χ (right panels), for the Van der Waals U_{VdW} , and dipolar potentials U_{dip} . The dotted line in the left panels is the contact approximation result. Different curves in each panel correspond to different values of the potential range \tilde{R} , green and blue symbols correspond to $\tilde{R} = 0.001$ and 0.005 respectively. The vertical dotted line in the right panels indicate the values of χ at resonance for the different potentials.

figure 9 we observe that, for the purely attractive potentials, the BEC regime exponential decay does depend more on the value of \tilde{R} than on the potential itself. At the same time, it is quite remarkable that the oscillatory behavior in the BCS side is essentially independent of the interatomic potential, showing merely a weak dependence regarding the slow long range pair decay. That is, all cases show the same oscillatory behavior that can be fitted quite well as $\sin \tilde{r} = \sin k_{\text{F}} r$, indicating in turn that the oscillation wavelength is essentially the

mean atomic separation $\bar{d} \sim 1/k_{\text{F}}$, regardless of the potential. In contrast, from figure 10, we see that the BEC and BCS states can not be identified neither at the sign change of the chemical potential nor at unitarity. In other words, in the case of potentials with both, repulsive and attractive terms, the pair functions show a wide and different crossover. Certainly, in the deep a BEC and BCS regimes the pair functions are localized and oscillatory respectively.

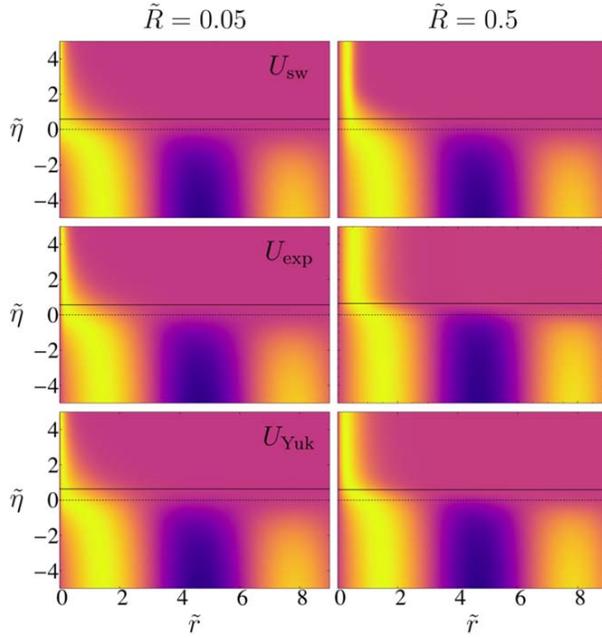


Figure 9. Density plot of the normalized pair wavefunctions ($\tilde{\psi}$) associated to square well, exponential and Yukawa potentials. Panels on the left and right correspond to potential ranges $\tilde{R} = 0.05$ and $\tilde{R} = 0.5$. Continuous and dashed lines indicate $\mu = 0$ and $\eta = 0$ respectively. The brightest areas (yellow) correspond to $\tilde{\psi} = 1$ interpolating to the darkest areas (purple) corresponding to $\tilde{\psi} = -1$, with $\tilde{\psi} = \tilde{r}\psi / \max(\tilde{r}\psi)$.

5. Final remarks

The present investigation was focused on the $T = 0$ BCS-BEC crossover analysis of a two component mixture of fermions interacting through finite range potentials. In particular, working within the mean field approach, we considered two kinds of model potentials representing the interaction between fermions: purely attractive potentials and potentials having contributions of two types, a repulsive barrier at the origin and an attractive tail starting from a certain distance. Within the first category we considered the square well, the exponential and the Yukawa potentials, while the Van der Waals and dipolar potentials belonging to the second category respectively. The zero temperature physics of these five different model potentials, was addressed as a function of two independent parameters, the range R and the potential depth V_0 . Since pairing along the crossover is directly related with the interacting potential, we first studied the two-body physics described in terms of the s -wave scattering length showing that the occurrence of a potential resonance, that is the emergence of a bound state, takes place at a fixed value of the variable $\chi = \tilde{R}\sqrt{\tilde{V}_0}$ for each potential.

From the analysis of the thermodynamics for the square well, exponential, and Yukawa potentials we arrived to one of the main results of this manuscript, that is, the universal character of the BCS-BEC crossover. According with the so called unitary limit, when the s -wave scattering length a diverges for a certain value of the potential depth V_0 , this

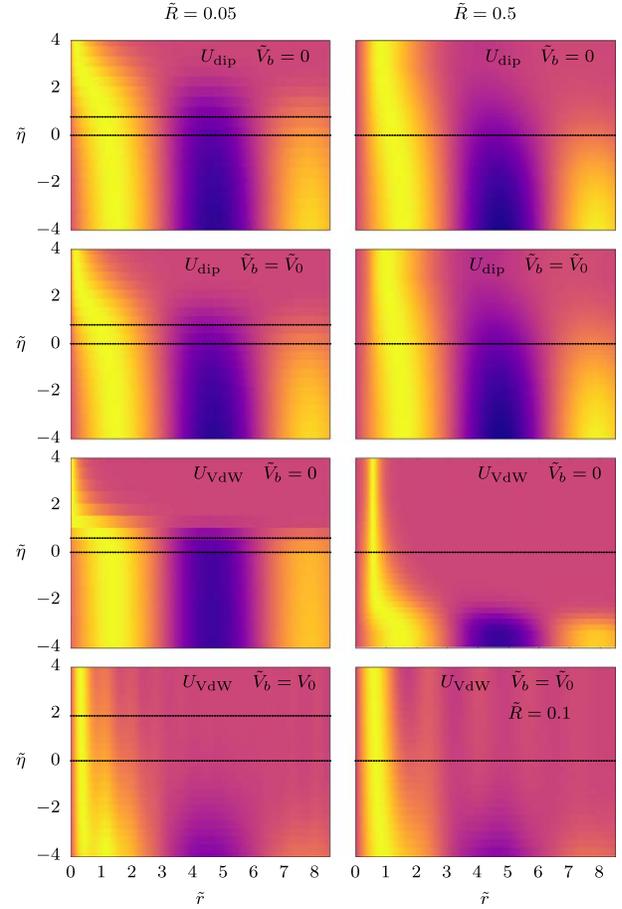


Figure 10. Density plot of the normalized pair wavefunctions ($\tilde{\psi}$) associated to dipolar and Van der Waals potentials. Panels on the left and right correspond to potential ranges $\tilde{R} = 0.05$ and $\tilde{R} = 0.5$. Continuous and dashed lines indicate $\mu = 0$ and $\eta = 0$ respectively. The brightest areas (yellow) correspond to $\tilde{\psi} = 1$ interpolating to the darkest areas (purple) corresponding to $\tilde{\psi} = -1$, with $\tilde{\psi} = \tilde{r}\psi / \max(\tilde{r}\psi)$. The right bottom panel corresponds to pair functions associated to U_{VdW} and $\tilde{R} = 0.1$.

divergence overwhelms any other physical length that participates in the thermodynamics of the system, or alternatively, it indicates that the system loses its length scales [25]. Hence, not only a but all the other lengths should not play any significant role on the thermodynamics. In the case of the model potentials purely attractive the universal character is manifested as the occurrence of the smooth transition within a unified region bounded by the s -wave scattering length divergence, that is at unitarity, and the region associated to the chemical potential sign change. This conclusion emerges from the behavior of pairing wave functions, since the BCS-BEC crossover does seem to spread out among the resonance $\eta = 0$ and the state where the chemical potential changes its value from positive to negative. This result comes directly from the fact that the potentials here considered depend on two parameters, and not on just a single one as in the case of Leggett scheme. In other words, the thermodynamics of a system with finite range potential does not explicitly depend

on the scattering length but, as in the cases here studied, on the two parameters V_0 and R of the potential. This, as we have already discussed, yields two appropriate dimensionless parameters, $\chi = (2mR^2V_0/\hbar^2)^{1/2}$ and $\tilde{R} = k_F R$. Interestingly, at resonance, or unitarity, $\tilde{\eta} = 0$, χ takes a unified value for the given potential, but the thermodynamics still depends on \tilde{R} . The other relevant result of our investigation is that the behavior of the pair functions linked to potentials having both repulsive and attractive contributions, prevent us to distinguish a definite region of the BCS-BEC crossover. That is, in contrast to the result associated to potentials with purely attractive contribution, the form of the pair functions is consistent with a wide crossover.

Although the present study was originally motivated by the usual experiments in atomic ultracold gases [1–5], our results should also be relevant in either, experiments performed with cold atoms in optical cavities where tunable-range effective atomic interactions can be engineered [40, 41], or in systems belonging to high energy physics where nuclear interactions [42–44] can be properly modeled by specific potentials. Another kind of phenomenon in which our results could have an impact is the electron–hole bilayer system [45, 46], in which a thin insulating barrier gives rise to an effective screened Coulomb interaction, thus boosting the pairing strength and leading to superfluidity. Certainly, emergence of superfluidity in ultracold atoms have also been tested in models of Fermi molecules confined in bilayer arrays [47, 48].

Acknowledgments

E.N acknowledges financial support from a CONACYT scholarship. This work was partially funded by grants IN105217, IN109619 DGAPA (UNAM) and CONACYT 255573.

ORCID iDs

S F Caballero-Benítez  <https://orcid.org/0000-0001-7979-0989>

V Romero-Rochín  <https://orcid.org/0000-0003-4987-1600>

R Paredes  <https://orcid.org/0000-0001-8855-606X>

References

- [1] Regal C A, Greiner M and Jin D S 2004 Observation of resonance condensation of fermionic atom pairs *Phys. Rev. Lett.* **92** 040403
- [2] Zwierlein M W, Stan C A, Schunck C H, Raupach S M F, Kerman A J and Ketterle W 2004 Condensation of pairs of fermionic atoms near a feshbach resonance *Phys. Rev. Lett.* **92** 120403
- [3] Kinast J, Hemmer S L, Gehm M E, Turlapov A and Thomas J E 2004 Evidence for superfluidity in a resonantly interacting Fermi gas *Phys. Rev. Lett.* **92** 150402
- [4] Bourdel T, Khaykovich L, Cubizolles J, Zhang J, Chevy F, Teichmann M, Tarruell L, Kokkelmans S J J M F and Salomon C 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 050401
- [5] Chin C, Bartenstein M, Altmeyer A, Riedl S, Jochim S, Hecker Denschlag J and Grimm R 2004 Observation of the pairing gap in a strongly interacting Fermi gas *Science* **305** 1128–30
- [6] Blatt J M 1974 *Theory of Superconductivity* (New York: Academic Press)
- [7] Eagles D M 1969 Possible pairing without superconductivity at low carrier concentrations in bulk and thin-film superconducting semiconductors *Phys. Rev.* **186** 456
- [8] Leggett A J 1980 Cooper pairing in spin-polarized Fermi systems *J. Phys. (Paris), Colloq.* **41** 7
- [9] Leggett A J 1980 Diatomic molecules and Cooper pairs *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter* vol **115**
- [9] Nozieres P and Schmitt-Rink S 1985 Bose condensation in an attractive fermion gas: from weak to strong coupling superconductivity *J. Low Temp. Phys.* **59** 195
- [10] Holland M, Kokkelmans S J J M F, Chiofalo M L and Walser R 2001 Resonance superfluidity in a quantum degenerate Fermi gas *Phys. Rev. Lett.* **87** 120406
- [11] Timmermans E, Furuya K, Milonni P W and Kerman A K 2001 Prospect of creating a composite Fermi–Bose superfluid *Phys. Lett. A* **285** 228
- [12] Ohashi Y and Griffin A 2002 BCS-BEC crossover in a gas of Fermi atoms with a feshbach resonance *Phys. Rev. Lett.* **89** 130402
- [13] Calvanese Strinati G, Pieri P, Röpke G, Schuck P and Urban M 2018 The BCS-BEC crossover: from ultra-cold Fermi gases to nuclear systems *Phys. Rep.* **738** 1–76
- [14] Kurkcuoglu D M and Sá de Melo C A R 2018 Color superfluidity of neutral ultracold fermions in the presence of color-flip and color-orbit fields *Phys. Rev. A* **97** 023632
- [15] Kinnunen J J, Baarsma J E, Martikainen J-P and Törmä P 2018 The Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov state for ultracold fermions in lattice and harmonic potentials: a review *Rep. Prog. Phys.* **81** 046401
- [16] Ku M J H, Ji W, Mukherjee B, Guardado-Sanchez E, Cheuk L W, Yefsah T and Zwierlein M W 2014 Motion of a solitonic vortex in the BCS-BEC crossover *Phys. Rev. Lett.* **113** 065301
- [17] Husmann D, Uchino S, Krinner S, Lebrat M, Giamarchi T, Esslinger T and Brantut J-P 2015 Connecting strongly correlated superfluids by a quantum point contact *Science* **350** 1498–501
- [18] Valtolina G et al 2015 Josephson effect in fermionic superfluids across the BCS-BEC crossover *Science* **350** 1505
- [19] Burchianti A, Scazza F, Amico A, Valtolina G, Seman J A, Fort C, Zaccanti M, Inguscio M and Roati G 2018 Connecting dissipation and phase slips in a josephson junction between fermionic superfluids *Phys. Rev. Lett.* **120** 025302
- [20] Jáuregui R, Paredes R and Toledo Sánchez G 2007 BCS-BEC crossover of a trapped Fermi gas without using the local density approximation *Phys. Rev. A* **76** 011604
- [21] Carlson J, Chang S-Y, Pandharipande V R and Schmidt K E 2003 Superfluid Fermi gases with large scattering length *Phys. Rev. Lett.* **91** 050401
- [21] Chang S Y, Pandharipande V R, Carlson J and Schmidt K E 2004 *Phys. Rev. A* **70** 043602
- [22] Astrakharchik G E, Boronjat J, Casulleras J and Giorgini S 2004 equation of state of a Fermi gas in the BCS-BEC crossover: a quantum monte carlo study *Phys. Rev. Lett.* **93** 200404
- [23] Parish M M, Mihaila B, Timmermans E M, Blagoev K B and Littlewood P B 2005 BCS-BEC crossover with a finite-range interaction *Phys. Rev. B* **71** 064513

- [24] Caballero-Benítez S F, Paredes R and Romero-Rochín V 2013 The contact in the BCS-BEC crossover for finite range interacting ultracold Fermi gases *Phys. Lett. A* **377** 1756
- [25] Ho T-L 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 090402
- [26] Mekhov I B and Ritsch H 2012 Quantum optics with ultracold quantum gases: towards the full quantum regime of the light-matter interaction *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45** 102001
- [27] Caballero-Benitez S F and Mekhov I B 2015 Quantum optical lattices for emergent many-body phases of ultracold atoms *Phys. Rev. Lett.* **115** 243604
- [28] Caballero-Benitez S F, Mazzucchi G and Mekhov I B 2016 Quantum simulators based on the global collective light-matter interaction *Phys. Rev. A* **93** 063632
- [29] Camacho-Guardian A, Paredes R and Caballero-Benitez S F 2017 Quantum simulation of competing orders with fermions in quantum optical lattices *Phys. Rev. A* **96** 051602(R)
- [30] Sun B Y, Toki H and Meng J 2010 Relativistic description of BCS-BEC crossover in nuclear matter *Phys. Lett. B* **683** 134
- [31] Toledo Sánchez G and Piekarewicz J 2002 Modeling the strangeness content of hadronic matter *Phys. Rev. C* **65** 045208
- [32] Sun T T, Sun B Y and Meng J 2012 BCS-BEC crossover in nuclear matter with the relativistic Hartree-Bogoliubov theory *Phys. Rev. C* **86** 014305
- [33] Rarita W and Present R 1937 *Phys. Rev.* **51** 788
- [34] Pethick C and Smith H 2008 *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases* 2nd edn
- [35] Jeszenszki P, Cherny A-Y and Brand J 2018 *s*-wave scattering length of a Gaussian potential *Phys. Rev. A* **97** 042708
- [36] Chen Q, Stajic J, Tan S and Levin K 2005 BCS-BEC crossover: from high temperature superconductors to ultracold superfluids *Phys. Rep.* **412** 1-88
- [37] Chin C and Julienne P S 2005 Radio-frequency transitions on weakly bound ultracold molecules *Phys. Rev. A* **71** 012713
- [38] Bartenstein M, Altmeyer A, Riedl S, Geursen R, Jochim S, Chin C, Hecker Denschlag J and Grimm R 2005 Precise determination of ^6Li cold collision parameters by radio-frequency spectroscopy on weakly bound molecules *Phys. Rev. Lett.* **94** 103201
- [39] Ketterle W and Zwierlein M W 2008 *Riv. Nuovo Cimento* **31** 247-422
- [40] Ritsch H, Domokos P, Brennecke F and Esslinger T 2013 Cold atoms in cavity-generated dynamical optical potentials *Rev. Mod. Phys.* **85** 553
- [41] Renate L, Lorenz H, Nishant D, Manuele L, Rafael M, Tobias D and Esslinger T 2016 Quantum phases from competing short- and long-range interactions in an optical lattice *Nature* **532** 476
- [42] Gezerlis A and Carlson J 2008 Strongly paired fermions: cold atoms and neutron matter *Phys. Rev. C* **77** 032801
- [43] Lacroix D 2016 Density-functional theory for resonantly interacting fermions with effective range and neutron matter *Phys. Rev. A* **94** 043614
- [44] Lacroix D, Boulet A, Grasso M and Yang C-J 2017 From bare interactions, low-energy constants, and unitary gas to nuclear density functionals without free parameters: application to neutron matter *Phys. Rev. C* **95** 054306
- [45] Zarenia M, Perali A, Peeters F M and Neilson D 2016 Large gap electron-hole superfluidity and shape resonances in coupled graphene nanoribbons *Sci. Rep.* **6** 24860
- [46] Zarenia M, Neilson D and Peeters F M 2017 Inhomogeneous phases in coupled electron-hole bilayer graphene sheets: charge density waves and coupled Wigner crystals *Sci. Rep.* **7** 11510
- [47] Camacho-Guardian A and Paredes R 2016 Superfluidity of a dipolar Fermi gas in 2D optical lattices bilayer *Ann. Phys.* **528** 778
- [48] Domínguez-Castro G A and Paredes R 2019 *p*-Wave superfluid phases of Fermi molecules in a bilayer lattice array *Ann. Phys.* **531** 1800316
- [49] Castin Y 2004 Fermi gases, BCS-BEC crossover and strongly interacting regime, Les Houches