



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

SUPERCONDUCTIVIDAD INHOMOGENEA EN EL  
FORMALISMO DE BOGOLIUBOV-DE GENNES

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:

EDGAR RAFAEL BRICEÑO HERNÁNDEZ



DIRECTOR DE TESIS:

DR. CHUMIN WANG CHEN

Ciudad Universitaria, CD.MX , Agosto 2020



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

# RESUMEN

La superconductividad es un fenómeno de muchos cuerpos en el cual el material presenta nula resistividad eléctrica y a la vez un diamagnetismo perfecto (efecto Meissner). Existen dos tipos de superconductores; los de tipo I se caracterizan por tener un único estado superconductor donde el material expulsa totalmente el flujo magnético de su interior, en cambio los de tipo II poseen un estado adicional donde existe una penetración parcial de las líneas de campo magnético cuantizadas (estado de Abrikosov). En la presente tesis se estudian los superconductores de tipo II ya que éstos tienen una temperatura crítica y un campo crítico mayores, por lo que tienen mayor interés tecnológico.

La primera teoría microscópica fue desarrollada por J. Bardeen, L. Cooper y R. Schrieffer en el espacio recíproco y posteriormente fue extendida al espacio real por N. Bogoliubov y P. de Gennes, la cual tiene la virtud de poder estudiar la inhomogeneidad del estado superconductor en el espacio, por ejemplo, alrededor de un vórtice magnético en el estado de Abrikosov. Dichos vórtices serán obtenidos a partir de las ecuaciones integrales de Bogoliubov-de Gennes que se resuelven en forma autoconsistente en un espacio combinado real-recíproco. Los resultados muestran en detalle la forma geométrica de los vórtices magnéticos en superconductores así como la presencia de una supercorriente alrededor de cada vórtice. Así mismo, los espectros de cuasipartículas permiten cuantificar cantidades termodinámicas medibles experimentalmente. El estudio de la superconductividad en el espacio real requiere de métodos novedosos que permiten abordar un número macroscópico de grados de libertad y esperamos que la presente tesis contribuya en la búsqueda de dichos métodos.

# Índice general

<b>Introducción</b>	<b>I</b>
<b>1 Fenomenología</b>	<b>1</b>
§1.1 Ecuaciones de London . . . . .	1
§1.2 No localidad en superconductores puros . . . . .	4
§1.3 Energía libre del estado superconductor . . . . .	5
§1.4 Teoría de Ginzburg-Landau . . . . .	6
§1.5 La fase de Shubikov en superconductores tipo II . . . . .	7
§1.6 Cuantización del flujo magnético . . . . .	9
§1.7 Propiedades termodinámicas de los superconductores tipo II . . . . .	9
<b>2 Teorías Microscópicas</b>	<b>12</b>
§2.1 Atracción por intercambio de fonones . . . . .	12
§2.2 Pares de Cooper . . . . .	14
§2.3 La teoría BCS . . . . .	16
§2.4 Excitaciones elementales: transformación de Bogoliubov-Valantin . . . . .	19
<b>3 Vórtices magnéticos en red cuadrada</b>	<b>24</b>
§3.1 Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes . . . . .	24
§3.2 Transformación de norma . . . . .	26
§3.3 Teorema de Bloch Magnético . . . . .	28
§3.4 El modelo de Hubbard . . . . .	32
§3.5 Substitución de Peierls en el modelo de Hubbard . . . . .	33
§3.6 Ecuaciones BdG en el modelo de Hubbard . . . . .	35
§3.7 Implementación numérica . . . . .	38
§3.8 Vórtices magnéticos en nanoestructuras bidimensionales . . . . .	39
§3.9 Longitud de coherencia en nanoestructuras cuadradas . . . . .	45
§3.10 Vórtices magnéticos en una red cuadrada periódica . . . . .	49
<b>Conclusiones</b>	<b>51</b>
<b>Apéndice A Valores esperados del hamiltoniano reducido</b>	<b>52</b>
<b>Apéndice B Solución asintótica de integrales</b>	<b>55</b>
<b>Apéndice C Conmutador de <math>\hat{\psi}_{\downarrow}(\vec{r})</math> y <math>\hat{H}_{MF}</math></b>	<b>57</b>
<b>Apéndice D Promedios térmicos de cuasipartículas</b>	<b>58</b>



# Introducción

La superconductividad es un fenómeno físico fascinante que ha atraído la atención de la comunidad científica desde su descubrimiento en 1911 por el físico Kamerlingh Onnes [1], descubrimiento que le valió el premio Nobel en 1913 y desenvocó en una intensa actividad de investigación enfocada en la búsqueda de su origen.

Aunado a la desaparición de la resistencia eléctrica, en 1933 Walther Meissner y Robert Ochsenfeld mostraron que cuando un superconductor se somete a un campo magnético externo, éste desvía las líneas de flujo de tal forma que anula la presencia de campo magnético en el interior, comportándose como un diamagneto perfecto [2]. Posteriormente se observó que la fase superconductor era limitada tanto por una temperatura crítica como por un campo magnético crítico. En 1957, A. Abrikosov [3] mostró que la superconductividad puede desaparecer vía dos escenarios distintos lo cual resultó en la clasificación de superconductores de tipo I y II. Estos últimos presentan además de la fase de Meissner, una fase mixta que permite la penetración del campo magnético en forma de vórtices, cuyo estudio constituye el tema principal en la presente tesis.

Los esfuerzos por encontrar una teoría microscópica satisfactoria de la superconductividad se vieron dilatados 44 años desde su descubrimiento, hasta que en 1955 John Bardeen, Leon Cooper y Robert Schrieffer (BCS) [Bardeen, 1955], haciendo uso del método variacional de la mecánica cuántica, propusieron una función de onda de muchos cuerpos mediante la cual explicaron analíticamente la mayoría de los resultados experimentales de forma cualitativa y mostraron que los portadores de carga no eran electrones individuales sino pares de electrones (más conocidos como pares de Cooper) y que es necesario aplicar una energía mínima para crear los primeros estados excitados llamada la brecha energética superconductor la cual juega un rol esencial en el presente trabajo.

Un año después Nikolai Bogoliubov planteó un formalismo para estudiar las excitaciones elementales del estado base superconductor y posteriormente en 1989 P. de Gennes extendió el estudio de dichas excitaciones al espacio real, lo cual le permitió considerar los efectos de las inhomogeneidades espaciales tales como impurezas y la presencia de vórtices magnéticos.

En 1986 Bednorz y Muller descubrieron los primeros cupratos superconductores de altas temperaturas [Bednorz, 1986] y con ello surgió la necesidad de extender la teoría de Bogoliubov-de Gennes hacia los sólidos de banda electrónica estrecha mediante el uso del modelo de amarre fuerte en contraste al modelo continuo en la teoría BCS.

En la presente tesis, a partir del modelo de Hubbard atractivo se hace un estudio de la formación de vórtices magnéticos en superconductores tipo II y sus propiedades termodinámicas en redes cuadradas bidimensionales con integrales de salto a primeros y segundos vecinos.

# Capítulo 1

## Fenomenología

En 1911, habiendo perfeccionado la técnica de licuefacción de gases, H. Kamerlingh Onnes usó helio líquido a 4.2 K para enfriar una muestra de Mercurio. Onnes observó que a dichas temperaturas, la resistividad de la muestra desaparecía de forma abrupta (Figura 1.1). Posteriormente repitió el experimento para otros metales tales como el plomo y estaño, notando en ambos casos que existía una temperatura crítica ( $T_c$ ) a partir de la cual ocurría la misma transición abrupta [Tinkham, 1996]. Tal fenómeno en el cual una corriente fluye por un material sin presentar resistencia eléctrica se conoce como superconductividad. Se ha medido el campo magnético producido por una supercorriente circulante, el cual tiene un tiempo de decaimiento característico de al menos  $10^5$  años.

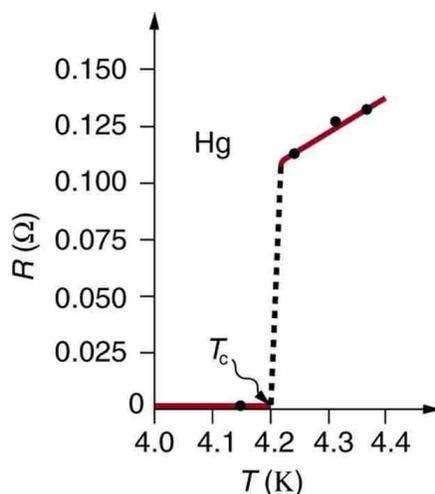


Figura 1.1: Resistencia eléctrica ( $R$ ) como función de la temperatura ( $T$ ) para una muestra de Mercurio.

Actualmente se sabe que cuando un material superconductor alcanza  $T_c$ , éste presenta una discontinuidad en su calor específico, por lo que se entiende que el estado superconductor es una fase termodinámica. Además de desaparecer por encima de  $T_c$ , la fase superconductora se anula para campos magnéticos altos, siendo  $H_c$  el valor mínimo de campo aplicado necesario para destruir el estado superconductor y dicho valor depende de la temperatura. Así, la fase normal y la superconductora están separadas por la curva  $H_c(T)$  como se muestra en la Figura 1.2.

En 1933 W. Meissner y R. Ochsenfeld descubrieron que por debajo de  $H_c$ , un material superconductor presenta una exclusión completa del flujo magnético en su interior (en la siguiente sección se mostrará que en realidad el campo logra penetrar al material en una capa muy delgada de grosor  $\lambda$ ). Dicho fenómeno se conoce como el efecto Meissner.

### 1.1. Ecuaciones de London

Dentro del modelo de Drude, un conductor con resistividad finita se rige por la siguiente ecuación fundamental [Mangin, 2017],

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q\vec{E} - \frac{m}{\tau}\vec{v}, \quad (1.1)$$

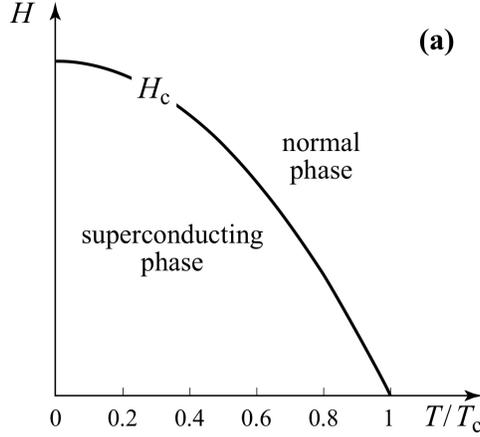


Figura 1.2: Separación de las fases normal y superconductora por la curva  $H_c(T)$ .

donde  $\vec{v}$  es la velocidad de arrastre y  $\tau$  es el tiempo de relajación, el cual se relaciona con la conductividad eléctrica ( $\sigma$ ) a través de la fórmula de Drude dada por

$$\sigma = \frac{nq^2\tau}{m}, \quad (1.2)$$

siendo  $q$  la carga,  $m$  la masa y  $n$  la densidad de los portadores de carga. Al sustituir  $\vec{v}$  por la densidad de corriente  $\vec{J} = nq\vec{v}$  en (1.1) se llega a que

$$\frac{m}{nq^2} \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} = \vec{E} - \rho \vec{J}, \quad (1.3)$$

donde  $\rho = 1/\sigma$  es la resistividad eléctrica. Cuando la corriente se vuelve estacionaria ( $\partial \vec{J} / \partial t = 0$ ), dicha relación se transforma en la ley de Ohm  $\vec{E} = \rho \vec{J}$ .

A temperatura cero, el estado de equilibrio de un conductor neutro que se encuentra inmerso en un campo magnético estático es el de menor energía total por unidad de volumen, la cual es la suma de las contribuciones cinética y magnética dada por

$$E_{tot} = \int_{\Omega} u \, d^3\vec{r} = \int_{\Omega} \left[ \frac{1}{2} mn\vec{v}^2(\vec{r}) + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2(\vec{r}) \right] d^3\vec{r}. \quad (1.4)$$

Usando  $\vec{J} = nq\vec{v}$  y la ley de Ampere  $\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}$  la ecuación (1.4) puede reescribirse como

$$E_{tot} = \int_{\Omega} u(\vec{B}, \nabla \times \vec{B}) \, d^3\vec{r} = \frac{1}{2\mu_0} \int_{\Omega} [\vec{B}^2 + \lambda_L^2 (\nabla \times \vec{B})^2] \, d^3\vec{r}, \quad (1.5)$$

donde  $\lambda_L^2 = m/n\mu_0 q^2$  y  $u = \frac{1}{2\mu_0} [\vec{B}^2 + \lambda_L^2 (\nabla \times \vec{B})^2]$ .

Una forma de encontrar la distribución espacial de campo magnético que minimice la energía de (1.4) es haciendo uso del cálculo de variaciones. Dado que la  $E_{tot}$  es una función de  $\vec{B}$ , podemos introducir un campo arbitrario  $\vec{B}'$  con la condición  $\vec{B}' \times \hat{n} = 0$  y un parámetro real  $h$  que satisfagan la siguiente relación

$$\left. \frac{d}{dh} E_{tot}(\vec{B} + h\vec{B}') \right|_{h=0} = 0, \quad (1.6)$$

entonces

$$\int_{\Omega} \frac{d}{dh} u(\vec{B} + h\vec{B}', \nabla \times \vec{B} + h\nabla \times \vec{B}') \Big|_{h=0} d^3\vec{r} = 0. \quad (1.7)$$

Usando la regla de cadena se tiene

$$\begin{aligned} \frac{du}{dh} &= \frac{\partial u}{\partial \vec{B}} \cdot \frac{d(\vec{B} + h\vec{B}')}{dh} + \frac{\partial u}{\partial(\nabla \times \vec{B})} \cdot \frac{d[\nabla \times \vec{B} + h(\nabla \times \vec{B}')]}{dh} \\ &= \frac{\partial u}{\partial \vec{B}} \cdot \vec{B}' + \frac{\partial u}{\partial(\nabla \times \vec{B})} \cdot (\nabla \times \vec{B}') \end{aligned} \quad (1.8)$$

Empleando la identidad  $\nabla \cdot (\vec{u} \times \vec{w}) = \vec{w} \cdot (\nabla \times \vec{u}) - \vec{u} \cdot (\nabla \times \vec{w})$  podemos obtener

$$\frac{\partial u}{\partial(\nabla \times \vec{B})} \cdot (\nabla \times \vec{B}') = \nabla \cdot \left[ \vec{B}' \times \frac{\partial u}{\partial(\nabla \times \vec{B})} \right] + \left[ \nabla \times \frac{\partial u}{\partial(\nabla \times \vec{B})} \right] \cdot \vec{B}'. \quad (1.9)$$

Al sustituir (1.8) y (1.9) en (1.7) y hacer uso de la condición de frontera  $\vec{B}' \times \hat{n} = 0$ , (1.7) se transforma en

$$\int \left[ \frac{\partial u}{\partial \vec{B}} + \nabla \times \frac{\partial u}{\partial(\nabla \times \vec{B})} \right] \cdot \vec{B}' d^3\vec{r} = 0. \quad (1.10)$$

Como el campo  $\vec{B}'$  es arbitrario, (1.10) se cumple sólo si:

$$\frac{\partial u}{\partial \vec{B}} + \nabla \times \frac{\partial u}{\partial(\nabla \times \vec{B})} = 0. \quad (1.11)$$

Efectuando las derivadas parciales a la expresión de  $u = \frac{1}{2\mu_0} [\vec{B}^2 + \lambda_L^2 (\nabla \times \vec{B})^2]$ , (1.11) se convierte en

$$\vec{B} + \lambda_L^2 \nabla \times (\nabla \times \vec{B}) = 0, \quad (1.12)$$

la cual se conoce como la segunda ecuación de London.

A partir de la ley de Ampere,  $\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}$ , (1.12) se transforma en

$$\nabla \times \vec{J} = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \vec{B}. \quad (1.13)$$

Como el sistema que se encuentra en un estado estacionario y dado que el campo eléctrico en el superconductor es nulo, entonces la ecuación (1.3) queda como

$$\rho \vec{J} = 0. \quad (1.14)$$

Dado que en los superconductores  $\rho = 0$ , entonces los portadores de carga que minimizan la expresión de la energía en (1.4) también fluyen sin resistencia eléctrica.

Si resolvemos la ecuación (1.12) para una muestra rectangular semi-infinita delimitada por el plano y-z (Figura 1.3) con el campo apuntando en dirección  $\hat{y}$ , obtenemos que la solución para  $\vec{B}$  sería

$$\vec{B} = \vec{B}_0 \exp(-x/\lambda_L) \quad (1.15)$$

para  $x > 0$ , donde  $\lambda_L$  es la longitud de penetración del campo magnético y para  $x \gg \lambda_L$  el campo es prácticamente nulo. Los valores típicos de  $\lambda_L$  son del orden de micrómetros, por lo que son longitudes pequeñas en muestras macroscópicas, lo cual implica que las ecuaciones de London describen el efecto Meissner (Figura 1.4).

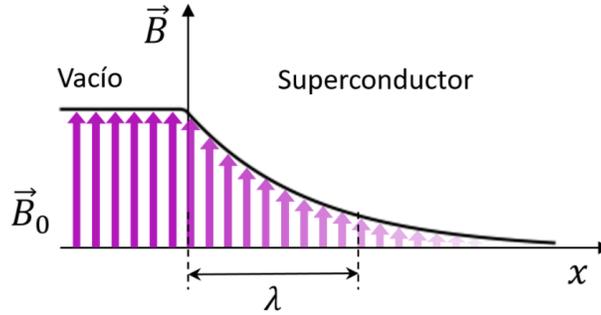


Figura 1.3: Variación del campo magnético  $\vec{B}$  en una muestra superconductora semi-infinita con interface en el plano  $yz$ .

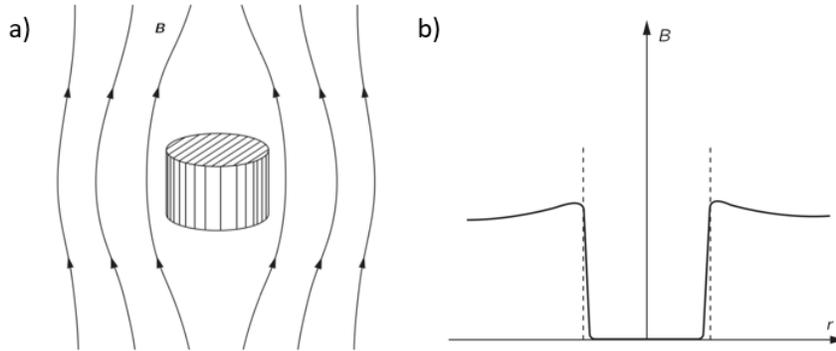


Figura 1.4: (a) Cilindro superconductor inmerso en un campo magnético; (b) Distribución de campo magnético  $B$  como función de  $r$  (Imagen proveniente de the Feynman Lectures on Physics página 594).

## 1.2. No localidad en superconductores puros

Dado que  $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ , la ecuación (1.13) se transforma en

$$\nabla \times \left( \vec{J} - \frac{1}{\mu_0 \lambda^2} \vec{A} \right) = 0, \quad (1.16)$$

es decir

$$\vec{J} = \frac{1}{\mu_0 \lambda^2} \vec{A} - \nabla \theta, \quad (1.17)$$

donde  $\theta$  es una función escalar cuya determinación depende de la elección de norma para  $\vec{A}$ .

En la norma de London,  $\vec{A}$  satisface  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$  y  $\vec{A} \cdot \hat{n} = 0$  en la frontera, esto junto con al condición de estacionaridad  $\nabla \cdot \vec{J} = 0$  y la condición a la frontera  $\vec{J} \cdot \hat{n} = 0$ , nos permite concluir que

$$\nabla^2 \theta = 0 \quad \text{y} \quad \nabla \theta \cdot \hat{n} = 0 \quad (1.18)$$

Lo anterior necesariamente implica que  $\nabla \theta = 0$  si el conductor es simplemente conexo (no tiene huecos en su interior). Así, llegamos a la relación

$$\vec{J} = \frac{1}{\mu_0 \lambda^2} \vec{A}. \quad (1.19)$$

En 1953 A. B. Pippard extendió la relación (1.19) para considerar efectos no locales [Pippard, 1953]

$$\vec{J}(\vec{r}) = -\frac{3ne^2}{4\pi\xi_0 m} \int \frac{\vec{R} \cdot \vec{A}(\vec{r}') \vec{R}}{R^4} e^{-R/\xi_0} d^3\vec{r}', \quad (1.20)$$

donde  $\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'$  y  $\xi_0$  es la longitud de coherencia. Se puede entender burdamente a la relación (1.20) como una generalización de (1.19) para portadores de carga no puntuales, tal que sus componentes interactúan con  $\vec{A}$  en distintos puntos, mientras que  $\vec{J}$  se evalúa en centro de dicho portador (Figura 1.5) [Mangin, 2017] y en lugar de tomar directamente el valor de  $A$  en el punto  $\vec{r}$  se promedia en una vecindad de radio  $\xi_0$  alrededor de  $\vec{r}$ . Si la variación espacial del campo magnético sólo es significativa en distancias del orden de  $\lambda \gg \xi$ ,  $\vec{A}$  se puede tomar como constante en toda la región de integración en (1.20), recuperando el resultado (1.19) y con ello la segunda ecuación de London.

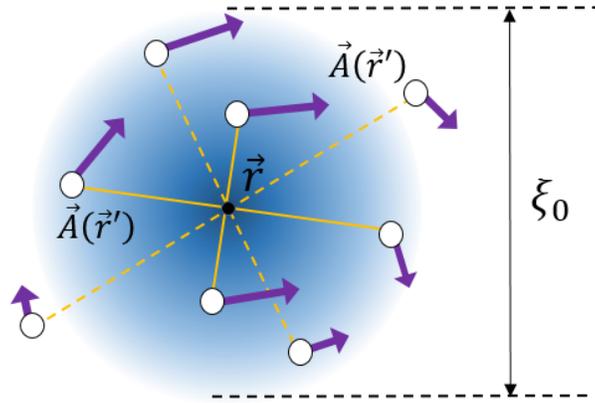


Figura 1.5: Portadores de carga no puntuales interactuando con  $\vec{A}$  en distintos puntos.

### 1.3. Energía libre del estado superconductor

Como ya vimos, un superconductor que presenta el efecto Meissner expulsa el flujo magnético de su interior, por lo que

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) = 0, \quad (1.21)$$

es decir  $\vec{M} = -\vec{H}$ . Por otro lado, el diamagnetismo perfecto se rompe por encima del campo crítico  $H_c(T)$  permitiendo la penetración completa del flujo magnético al interior del material, por lo que  $\vec{M} = 0$  para  $H > H_c$ .

Para un sistema magnético, el potencial termodinámico de interés es la energía libre de Gibbs:

$$G = U - TS - \mu_0 \vec{H} \cdot \vec{M}, \quad (1.22)$$

cuyo diferencial es

$$dG = -SdT - \mu_0 \vec{M} \cdot d\vec{H}. \quad (1.23)$$

Dado que la línea de campo crítico es la línea de coexistencia entre las fases normal y superconductor (Figura 1.2), se tiene

$$G_s(T, H_c(T)) = G_n(T, H_c(T)). \quad (1.24)$$

Integrando (1.23) a  $T$  constante para el estado superconductor desde  $H = 0$  hasta  $H_c$ , se obtiene

$$G_s(T, H_c) - G_s(T, 0) = \int_0^{H_c} -\mu_0 \vec{M} \cdot \vec{H} = \int_0^{\vec{H}_c} \mu_0 H dH = \frac{\mu_0}{2} H_c^2. \quad (1.25)$$

Por otro lado, en general la magnetización neta del estado normal para un metal es despreciable, i.e.,  $G_n(T, H_c) - G_n(T, 0) = 0$ . Empleando esta propiedad, (1.23) y (1.24), obtenemos que

$$G_s(T, 0) + \frac{\mu_0}{2} H_c^2 = G_s(T, H_c) = G_n(T, H_c) = G_n(T, 0), \quad (1.26)$$

o bien

$$G_n(T, 0) - G_s(T, 0) = \frac{\mu_0}{2} H_c^2. \quad (1.27)$$

La cantidad  $\mu_0 H_c^2/2$  se conoce como energía de condensación y (1.27) señala que el estado superconductor es menos energético que el normal. También se puede encontrar la diferencia de entropía entre ambas fases empleando (1.27) y la relación  $S = -(\partial G/\partial T)_H$ , obteniendo

$$S_n(T, 0) - S_s(T, 0) = -\mu_0 H_c \frac{dH_c}{dT}. \quad (1.28)$$

Si  $T = T_c$  entonces  $H_c(T_c) = 0$ , por lo que (1.27) establece que las entropías de ambas fases son iguales. Por otro lado, de la figura 1.2 se observa que  $dH_c/dT < 0$  para  $T < T_c$ , por lo que  $S_s < S_n$ , es decir, el estado superconductor es más ordenado que el normal.

#### 1.4. Teoría de Ginzburg-Landau

En 1937 Lev Landau desarrolló un modelo para describir transiciones de fase de segundo orden en la cual se introduce el concepto de parámetro de orden [Landau, 1937] que se anula por encima de la temperatura crítica ( $T > T_c$ ) pero que adquiere un valor distinto de cero debajo de la transición ( $T < T_c$ ). Posteriormente en 1950, junto con V. Ginzburg llevaron esta idea al caso de la transición de segundo orden para la superconductividad introduciendo una función de onda macroscópica  $\psi(\vec{r})$  que jugaba el rol de parámetro de orden, cuya norma era proporcional a la densidad local de portadores  $|\psi(\vec{r})|^2 \sim n(\vec{r})$  [Ginzburg, 1950]. La propuesta de Ginzburg y Landau fue en la densidad de energía libre de Helmholtz mediante la relación

$$f(\vec{r}) = f_n + \alpha |\psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2} \beta |\psi(\vec{r})|^4 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left| \left( \nabla - \frac{iq}{\hbar} \vec{A}(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) \right|^2 + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2(\vec{r}), \quad (1.29)$$

donde  $f_n$  es la densidad de energía de Helmholtz del estado normal en ausencia de campo magnético,  $\alpha$  y  $\beta$  son parámetros que dependen de la temperatura,  $m^*$  es un parámetro equivalente a la masa en la ecuación de Schrödinger y  $q$  es la carga de los portadores ( $q = 2e$  de acuerdo a la teoría BCS). Así, la configuración de equilibrio del parámetro de orden local debe ser aquella que minimice la energía libre total del sistema  $F = \int f(\psi, \psi^*, \nabla\psi, \nabla\psi^*) d^3\vec{r}$ . Para encontrar dicha configuración se emplea el mismo procedimiento usado en (1.5) empleando la función auxiliar  $\phi(\vec{r})$  real con condiciones nulas a la frontera y el parámetro variacional  $h$ , pero en este caso sólo variamos respecto a  $\psi^*$

$$f(\psi, \psi^*, \nabla\psi, \nabla\psi^*) \rightarrow f(\psi, \psi^* + h\phi, \nabla\psi, \nabla\psi^* + h\nabla\phi, \vec{A}). \quad (1.30)$$

La condición de extremo para  $F$  implica que

$$0 = \frac{dF}{dh} \Big|_{h=0} = \int \left[ \frac{\partial f}{\partial \psi^*} - \nabla \cdot \left( \frac{\partial f}{\partial (\nabla \psi^*)} \right) \right] \phi d^3\vec{r} + \int \nabla \cdot \left( \frac{\partial f}{\partial (\nabla \psi^*)} \phi \right) d^3\vec{r}, \quad (1.31)$$

donde al emplear el teorema de la divergencia y el hecho de que  $\phi = 0$  en la frontera obtenemos que la segunda integral en (1.27) es cero. Por otro lado, como  $\phi$  es arbitraria, se concluye que

$$\frac{\partial f}{\partial \psi^*} - \nabla \cdot \left( \frac{\partial f}{\partial (\nabla \psi^*)} \right) = 0 \quad (1.32)$$

y al emplear (1.29) llegamos a la primera ecuación de Ginzburg-Landau (G-L):

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \nabla - \frac{iq}{\hbar} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 \psi(\vec{r}) + \alpha \psi(\vec{r}) + \beta |\psi(\vec{r})|^2 \psi(\vec{r}) = 0. \quad (1.33)$$

Si ahora tomamos la variación de  $F$  respecto a  $\vec{A}$  obtenemos la segunda ecuación de G-L

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{A}) = \mu_0 \vec{J}, \quad (1.34)$$

donde

$$\vec{J}(\vec{r}) = -i \frac{q\hbar}{2m^*} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) - \frac{q^2}{m} |\psi(\vec{r})|^2 \vec{A}. \quad (1.35)$$

Uno de los casos más simples a examinar usando las ecuaciones de Ginzburg-Landau sería el caso de un superconductor que llena medio espacio como en el ejemplo de la sección 1.1. Entonces buscamos de la solución a la primera ecuación de G-L unidimensional en ausencia de campo magnético

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \alpha \psi + \beta \psi^3 = 0. \quad (1.36)$$

Identificando la longitud de coherencia  $\xi$  como

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m^* |\alpha|}, \quad (1.37)$$

tenemos que la solución normalizada de (1.36) está dada por

$$\psi = \left( \frac{|\alpha|}{\beta} \right)^{1/2} \tanh \left( \frac{x}{\sqrt{2}\xi} \right). \quad (1.38)$$

Por lo que  $\xi$  es una longitud característica que determina la distancia sobre la cual el parámetro de orden responde a una perturbación (en este caso la frontera), aunque dicha identificación es aproximada y en general,  $\xi$  de (1.37) y  $\xi_0$  de Pippard no son iguales.

## 1.5. La fase de Shubikov en superconductores tipo II

Supóngase que un metal llena el espacio y presenta simultáneamente la fase normal y superconductora (coexistencia de fases) de tal forma que la región  $x < 0$  se encuentra completamente en el estado normal y la interface es de nuevo el plano y-z. Si calculamos la energía libre de Gibbs del estado superconductor por unidad de superficie (Dada la simetría, la densidad de energía  $g$  sólo depende de  $x$ , no de  $y$  y  $z$ ) [Gennes, 1999]

$$G_s = A \int_0^\infty \left[ f_n - \frac{n_s \mu_0 H_c^2}{n} + \frac{1}{2\mu_0} B^2 - HB + \frac{\lambda^2}{2} (\nabla \times \vec{B})^2 \right] dx, \quad (1.39)$$

donde el primer término corresponde a la energía libre del estado normal cuando el campo es nulo, el segundo es la energía de condensación del estado superconductor con un factor de peso que

considera que cerca de la interface sólo la porción  $n_s/n_i$  de los electrones son superconductores [Mangin, 2017], el tercero es la energía magnética, el cuarto es el equivalente microscópico de  $HB$  y el quinto es la energía cinética de los electrones superconductores.

Al emplear los resultados obtenidos en (1.14) y (1.29) como modelos aproximados para  $\vec{B}$  y  $n$  en la interface y sustituir en (1.19), llegamos a:

$$\begin{aligned}
G_s &= A \int_0^\infty \left[ f_n - \frac{\mu_0}{2} H_c^2 \right] dx + A \int_0^\infty \left[ 1 - \tanh^2 \left( \frac{x}{\sqrt{2}\xi} \right) \right] dx \\
&+ A \int_0^\infty \mu_0 H^2 (e^{-2x/\lambda} - e^{-x/\lambda}) dx \\
&= F_s(H=0) + \mu_0 \frac{A}{2\sqrt{2}} \left[ H_c^2 - \sqrt{2} \frac{\lambda}{\xi} H^2 \right].
\end{aligned} \tag{1.40}$$

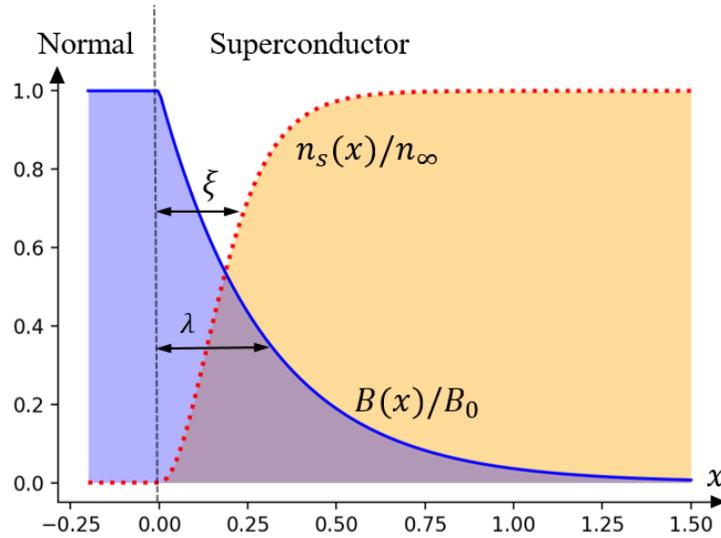


Figura 1.6: Variación espacial del campo magnético y la densidad de electrones superconductores alrededor de una interface N-S.

Definiendo  $\kappa \equiv \lambda/\xi$  se observa que pueden presentarse dos escenarios:  $\kappa > 2^{-1/4}$ , en cuyo caso implica que existe un campo  $H_{c1} = H_c/(2^{1/4}\kappa^{1/2}) < H_c$  tal que si  $H_{c1} < H < H_c$  entonces,  $G_s$  puede disminuir aún más incrementando el valor del área de la interface normal-superconductor, lo cual quiere decir que el sistema es inestable ante la formación dominios con interfaces N-S asociadas. Experimentos con difracción de neutrones y microscopía de efecto tunel muestran que en dicho estado, el campo magnético penetra el material formando una red triangular de vórtices [Cribier, 1964], [Fischer, 2007]. Por otro lado, si  $\kappa < 2^{-1/4}$ , entonces  $H$  alcanza  $H_c$  antes de llegar a  $H_{c1}$  por lo que el material presenta el efecto Meissner completo.

A. Abrikosov mostró que el punto exacto de la transición entre ambos comportamientos se daba en  $\kappa = 1/\sqrt{2}$  [Abrikosov, 1957]. En conclusión, la razón  $\kappa$  nos permite distinguir dos tipos de superconductores:

$$\begin{aligned}
\text{Tipo I} &\quad \text{si } \kappa < 1/\sqrt{2}, \\
\text{Tipo II} &\quad \text{si } \kappa > 1/\sqrt{2}.
\end{aligned} \tag{1.41}$$

## 1.6. Cuantización del flujo magnético

Los vórtices mencionados en la sección anterior poseen un flujo neto cuantizado en múltiplos enteros de  $\Phi_0 = h/(2e)$  conocido como el cuanto de flujo magnético. Para ver este efecto basta con recordar que la supercorriente sólo tiene un valor no nulo en una capa de grosor de orden  $\lambda$  alrededor de la interface normal-superconductor, por lo que si tomamos un contorno circular en el interior con una distancia mucho mayor que  $\lambda$  del centro del vórtice tendremos que la densidad de corriente es cero en dicha región. La densidad de corriente (1.35) para un sistema con parámetro de orden G-L dado por  $\psi(\vec{r}) = \rho^{1/2}(\vec{r})e^{i\theta(\vec{r})}$  está dada por

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{m} \left( \nabla\theta - \frac{q}{\hbar}\vec{A} \right) \rho, \quad (1.42)$$

lo cual implica que en el interior del superconductor

$$\vec{A} = \frac{\hbar}{q} \nabla\theta. \quad (1.43)$$

Si ahora calculamos el flujo encerrado por la región circular

$$\Phi_B = \int ds \cdot B = \int_S (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{s} = \oint_C \vec{A} \cdot d\vec{l} = \frac{\hbar}{q} \Delta\theta. \quad (1.44)$$

Dado que la función de onda  $\psi(\vec{r})$  es univaluada, el cambio en  $\theta$  alrededor del contorno ( $\Delta\theta$ ) debe ser un múltiplo entero de  $2\pi$ , por lo que el flujo está cuantizado en cantidades enteras de

$$\Phi_B = n \frac{h}{q}, \quad (1.45)$$

siendo  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

London predijo este resultado y postuló que  $q = e$  en (1.45) [London, 1950]. En 1967, Deaver y Fairbank demostraron experimentalmente que el cuanto de flujo era la mitad postulada por London, *i.e.*  $\Phi_B = h/2e$  [Deaver, 1967]. Por otro lado, Bardeen, Cooper y Schrieffer establecieron que la razón de dicho cuanto de flujo era debida a que los portadores de carga no son electrones individuales, sino pares de electrones con carga  $2e$ .

## 1.7. Propiedades termodinámicas de los superconductores tipo II

Como ya vimos, un superconductor de tipo II presenta dos fases termodinámicas: la fase de Meissner y la fase de Shubnikov [Figura 1.7].

A diferencia de los superconductores de tipo I, la magnetización no desaparece de forma abrupta entre la fase de Meissner y la normal sino que decrece de forma continua a lo largo de la fase de Shubnikov (Figura 1.8).

El hecho de que  $\vec{M}$  sea continua entre los campos críticos  $\vec{H}_1$  y  $\vec{H}_2$  implica que la transición de fase es de segundo orden. En efecto, si estudiamos la transición de fase Shubnikov-normal (el caso Meissner-Shubnikov es análogo) primero observamos que el calor latente de la transición es nulo,

$$l = T(S_n - S_s) = -T \left[ \left( \frac{\partial g_n}{\partial T} \right)_H - \left( \frac{\partial g_s}{\partial T} \right)_H \right]. \quad (1.46)$$

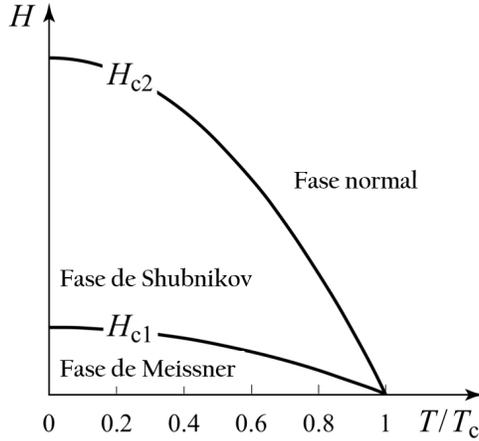


Figura 1.7: Diagrama de fases para un superconductor tipo II. Esquema proveniente de [Mangin, 2017].

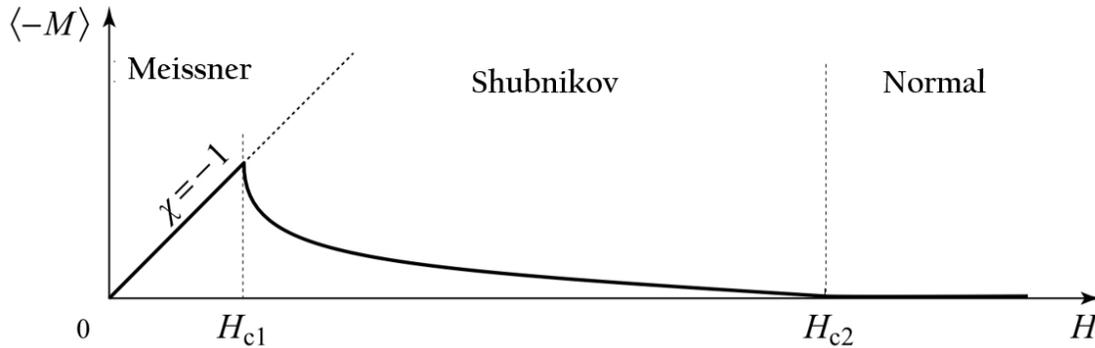


Figura 1.8: Dependencia de la magnetización promedio ( $\langle -M \rangle$ ) en el campo externo ( $H$ ) para un superconductor tipo II. Esquema proveniente de [Mangin, 2017].

Como estamos en la línea de coexistencia, se debe de cumplir  $g_n = g_s$  a lo largo de la curva  $H_{c2}(T)$  de la Figura 1.7, lo cual implica que  $dg_n(T, H = H_{c2})/dT = dg_s(T, H = H_{c2})/dT$ , pero

$$\frac{dg_i}{dT} = \left( \frac{\partial g_i}{\partial T} \right)_H + \frac{dH_{c2}}{dT} \left( \frac{\partial g_i}{\partial H} \right)_T \Big|_{H=H_{c2}}, \quad (1.47)$$

con  $i = s, n$ . También se sabe que  $(\partial g_i / \partial H)_T = -M_i$  por lo que

$$\left( \frac{\partial g_n}{\partial T} \right)_H - \left( \frac{\partial g_s}{\partial T} \right)_H = \frac{dH_{c2}}{dT} (M_n - M_s) \Big|_{H=H_{c2}} = 0. \quad (1.48)$$

Así, las ecuaciones (1.46) y (1.48) implican que el calor latente es nulo. Por otro lado, también se puede ver que si la derivada parcial de  $M$  respecto a  $H$  es discontinua en  $H_{c2}$ , entonces hay una discontinuidad en el calor específico entre ambas fases. Partiendo de

$$C_H^{(i)} = T \left( \frac{\partial S_i}{\partial T} \right)_H \quad (1.49)$$

y usando que las entropías de la fase normal y de Shubnikov son iguales a lo largo la línea de coexistencia, nos permite obtener

$$\frac{dS_n(T, H = H_{c2})}{dT} = \frac{dS_s(T, H = H_{c2})}{dT}, \quad (1.50)$$

entonces

$$\left(\frac{\partial S_n}{\partial T}\right)_H + \frac{dH_{c2}(T)}{dT} \left(\frac{\partial S_n}{\partial H}\right)_T \Big|_{H=H_{c2}} = \left(\frac{\partial S_s}{\partial T}\right)_H + \frac{dH_{c2}(T)}{dT} \left(\frac{\partial S_s}{\partial H}\right)_T \Big|_{H=H_{c2}}. \quad (1.51)$$

Por otro lado

$$\left(\frac{\partial S}{\partial H}\right)_T = \frac{\partial}{\partial H} \frac{\partial g}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \frac{\partial g}{\partial H} = - \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H \quad (1.52)$$

Del mismo modo,  $M_s(T, H = H_{c2}) = M_n(T, H = H_{c2})$  a lo largo de la línea de coexistencia, tenemos que

$$0 = \frac{dM_n}{dT} - \frac{dM_s}{dT} = \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H - \left(\frac{\partial M_s}{\partial T}\right)_H + \frac{dH_{c2}}{dT} \left[ \left(\frac{\partial M_n}{\partial H}\right)_T - \left(\frac{\partial M_s}{\partial H}\right)_T \right] \Big|_{H=H_{c2}} \quad (1.53)$$

Usando (1.48), (1.49) y (1.46), se tiene que

$$C_H^n - C_H^s = T \left[ \left(\frac{\partial S_n}{\partial T}\right)_H - \left(\frac{\partial S_s}{\partial T}\right)_H \right] = T \left(\frac{dH_{c2}}{dT}\right)^2 \left[ \left(\frac{\partial M_n}{\partial T}\right)_H - \left(\frac{\partial M_s}{\partial T}\right)_H \right] < 0, \quad (1.54)$$

ya que  $(\partial M_n/\partial T)_H = 0$  y  $(\partial M_n/\partial T)_H = -(\partial|M_n|/\partial T)_H > 0$ . Por lo tanto, la transición Superconductor-Normal es de segundo orden.

# Capítulo 2

## Teorías Microscópicas

### 2.1. Atracción por intercambio de fonones

En los superconductores convencionales, se entiende que el estado superconductor es causado por la formación de pares de Cooper, que son estados ligados de dos electrones mediados por una fuerza neta atractiva.

Cuando un par de electrones interactúa únicamente por el intercambio de un fotón (repulsión Columbiana) no es posible la formación de un estado ligado. H. Frohlich [Frohlich, 1950] propuso que las vibraciones en la red de un sólido pueden producir en una interacción electrón-electrón atractiva mediante el intercambio de fonones (cuantos de modos normales de vibración).

En el lenguaje de segunda cuantización, la interacción electrón-fonón puede ser descrita por el hamiltoniano [Godoy, 2002]

$$\hat{H}_{e-ph} = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \sigma} \left[ W(\mathbf{q}) \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{q}} + W^*(\mathbf{q}) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \right], \quad (2.1)$$

donde  $\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger$  ( $\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}$ ) es el operador de creación (aniquilación) de un electrón con momento  $\hbar\mathbf{k}$ ,  $\hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger$  ( $\hat{a}_{\mathbf{q}}$ ) es el operador de creación (aniquilación) para un fonón con momento  $\mathbf{q}$  y  $W(\mathbf{q})$  es la amplitud de acoplamiento. El hamiltoniano completo para el sistema electrón-fonón considerando a  $\hat{H}_{e-ph}$  como perturbación sería

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}} + \lambda \hat{H}_{e-ph} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_{e-ph}. \quad (2.2)$$

En la notación de Dirac, los eigen-estados no perturbados del hamiltoniano  $\hat{H}_0$  son los elementos del espacio de Fock [Greiner, 1996]

$$|n\rangle = |n_1, n_2, \dots, m_1, m_2, \dots\rangle = (\hat{c}_{\mathbf{k}_1, \sigma_1}^\dagger)^{n_1} (\hat{c}_{\mathbf{k}_2, \sigma_2}^\dagger)^{n_2} \dots \frac{(\hat{a}_{\mathbf{q}_1}^\dagger)^{m_1}}{\sqrt{m_1!}} \frac{(\hat{a}_{\mathbf{q}_2}^\dagger)^{m_2}}{\sqrt{m_2!}} \dots |0\rangle, \quad (2.3)$$

donde  $n_i = 0, 1$  ya que los electrones obedecen la estadística de Fermi y  $m_i = 0, 1, 2, \dots$  ya que los fonones obedecen la estadística de Bose. Por otro lado, los eigenestados  $|\psi_n\rangle$  del hamiltoniano (2.2) a segundo orden en la teoría de perturbaciones están dados por [Griffiths, 2005]

$$\begin{aligned} |\psi_n\rangle = & |n\rangle + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{H_{k,n}^{e-ph}}{E_n - E_k} |k\rangle - \frac{\lambda^2}{2} \sum_{k \neq n} \frac{|H_{k,n}^{e-ph}|^2}{(E_n - E_k)^2} |n\rangle \\ & + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \left[ \sum_{k' \neq n} \frac{H_{k,k'}^{e-ph} H_{k',n}^{e-ph}}{(E_n - E_k)(E_n - E_{k'})} - \frac{H_{k,n}^{e-ph} H_{n,n}^{e-ph}}{(E_n - E_k)^2} \right] |k\rangle, \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde  $H_{k,n}^{e-ph} = \langle k | \hat{H}_{e-ph} | n \rangle$ . Por lo que los elementos de matriz  $\lambda \hat{H}_{e-ph}$  en la representación  $|\psi_n\rangle$  a segundo orden de  $\lambda$  serían

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \lambda \hat{H}_{e-ph} | \psi_m \rangle &= \lambda \langle n | \hat{H}_{e-ph} | m \rangle + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{\langle n | \hat{H}_{e-ph} | k \rangle \langle k | \hat{H}_{e-ph} | m \rangle}{E_n - E_k} \\ &+ \lambda^2 \sum_{k \neq m} \frac{\langle n | \hat{H}_{e-ph} | k \rangle \langle k | \hat{H}_{e-ph} | m \rangle}{E_m - E_k} - \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{\langle n | \hat{H}_{e-ph} | k \rangle \langle k | \hat{H}_{e-ph} | m \rangle}{E_n - E_k} \delta_{n,m}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Notando que  $\langle n | \hat{H}_{e-ph} | n \rangle = 0$  ya que  $\hat{H}_{e-ph}$  modifica el estado de los electrones y el número de fonones del ket  $|n\rangle$ , los términos cuadráticos en (2.5) quedan en la forma más simple

$$\begin{aligned} &\sum_k \langle n | \hat{H}_{e-ph} | k \rangle \langle k | \frac{1}{E_n - E_k} \hat{H}_{e-ph} | m \rangle + \sum_k \langle n | \hat{H}_{e-ph} \frac{1}{E_m - E_k} | k \rangle \langle k | \hat{H}_{e-ph} | m \rangle \\ &= \sum_k \langle n | \hat{H}_{e-ph} | k \rangle \langle k | (E_n - \hat{H}_0)^{-1} \hat{H}_{e-ph} | m \rangle + \sum_k \langle n | \hat{H}_{e-ph} (E_m - \hat{H}_0)^{-1} | k \rangle \langle k | \hat{H}_{e-ph} | m \rangle \quad (2.6) \\ &= \langle n | \hat{H}_{e-ph} (E_n - \hat{H}_0)^{-1} \hat{H}_{e-ph} | m \rangle + \langle n | \hat{H}_{e-ph} (E_m - \hat{H}_0)^{-1} \hat{H}_{e-ph} | m \rangle. \end{aligned}$$

Para el caso en que  $|n\rangle$  y  $|m\rangle$  están constituidos por pares de electrones de la forma  $|m\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2\sigma_2}^\dagger |0\rangle$  y  $|n\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}_3\sigma_3}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_4\sigma_4}^\dagger |0\rangle$ , observamos que el término lineal  $\langle n | \hat{H}_{e-ph} | m \rangle = 0$  en (2.5), ya que se añade un fonón al estado  $|m\rangle$  que no contiene fonones, por lo que en (2.5) sólo sobreviven los términos cuadráticos. Desarrollando el primer término del último renglón de (2.6) (el segundo término es análogo) se tiene que

$$\begin{aligned} &\langle n | \hat{H}_{e-ph} (E_n - \hat{H}_0)^{-1} \hat{H}_{e-ph} | m \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{q}', \mathbf{k}', \sigma'} W(\mathbf{q}) W^*(\mathbf{q}') \langle n | \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{q}} (E_n - \hat{H}_0)^{-1} \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}', \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{a}_{\mathbf{q}'}^\dagger | m \rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Para que (2.7) no sea cero, se tiene que asegurar que los fonones creados a la derecha de  $(E_n - \hat{H}_0)^{-1}$  se aniquilen a la izquierda del mismo, lo cual implica que  $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$ . Además, si  $|m\rangle$  es de la forma  $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger |0\rangle$  entonces necesariamente  $|n\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger |0\rangle$ , lo cual está en concordancia con la conservación de momento. Así mismo, el estado intermedio  $|i\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger |m\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger |0\rangle$  es un eigenestado de  $\hat{H}_0$  con energía

$$E_i = \xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}, \quad (2.8)$$

por lo tanto

$$\begin{cases} E_n - E_i = \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}} \\ E_m - E_i = \xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}. \end{cases} \quad (2.9)$$

Al sustituir (2.9) y (2.7) en (2.5) y tomar  $\lambda = 1$

$$\begin{aligned} \langle \psi_n | \hat{H}_{e-ph} | \psi_m \rangle &= \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} |W(\mathbf{q})|^2 \frac{\langle n | \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} | m \rangle}{\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \\ &+ \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} |W(\mathbf{q})|^2 \frac{\langle n | \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} | m \rangle}{\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

En la segunda suma se pueden intercambiar los índices  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'$ ,  $\sigma \rightarrow \sigma'$ ,  $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$  y usar el hecho de que  $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{-\mathbf{q}}$  para así obtener

$$\sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} |W(q)|^2 \langle n | \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} | m \rangle \left( \frac{1}{\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}}} - \frac{1}{\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}} \right). \quad (2.11)$$

Entonces,  $\langle \psi_n | \hat{H}_{e-ph} | \psi_m \rangle$  se puede ver como el elemento matricial de un hamiltoniano efectivo actuando sobre los estados  $|n\rangle$  y  $|m\rangle$  de tal forma que

$$\langle \psi_n | \hat{H}_{e-ph} | \psi_m \rangle = \langle n | \hat{H}_{eff} | m \rangle, \quad (2.12)$$

obteniendo el resultado final

$$\hat{H}_{eff} = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} 2|W(q)|^2 \hbar\omega_{\mathbf{q}} \frac{\hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}}{(\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}})^2 - \hbar^2\omega_{\mathbf{q}}^2}. \quad (2.13)$$

Si comparamos esto con el hamiltoniano de repulsión Columbiana dado por [Sakurai, 2011]

$$\hat{H}_{el-el} = \frac{e^2}{2\Omega} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (2.14)$$

donde  $\Omega$  es el volumen del sistema y  $\mu$  es la longitud de apantallamiento de Thomas-Fermi, encontramos que el elemento matricial total sería

$$\langle n | \hat{H}_{el-el} + \hat{H}_{eff} | m \rangle = \frac{2\pi e^2}{\Omega(q^2 + \mu^2)} + \frac{2\hbar\omega_{\mathbf{q}} |W(q)|^2}{(\xi_{\mathbf{k}'} - \xi_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}})^2 - \hbar^2\omega_{\mathbf{q}}^2}. \quad (2.15)$$

Si  $|\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_{\mathbf{q}}$  y la repulsión coulumbiana en un metal no es muy grande, tenemos que (2.15) puede tornarse negativo, resultando en una atracción efectiva entre los electrones.

## 2.2. Pares de Cooper

El estado base de un gas de electrones que interactúan únicamente via el principio de exclusión de Pauli corresponde al mar de Fermi, sin embargo, L. Cooper mostró que dicho estado es inestable ante la formación de un estado ligado constituido por un par de electrones mediados por una interacción atractiva [Cooper, 1956]. Para estudiar la función de onda de los electrones ligados, hacemos un tratamiento mediante la ecuación de Schrodinger en el espacio de posiciones empleando la función de onda multipartícula

$$\Psi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi(1, 2), \quad (2.16)$$

donde hemos separado a  $\Psi$  en su parte espacial  $\psi$  y su parte espinorial  $\chi$ . Como los electrones obedecen la estadística de Fermi, la función de onda debe ser antisimétrica. Esta tesis se limita al estudio de la función espinorial en estado singulete

$$\chi(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle), \quad (2.17)$$

y en consecuencia la función de onda espacial es simétrica

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1). \quad (2.18)$$

Por otro lado,  $\psi$  obedece la ecuación de Schrodinger estacionaria

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (2.19)$$

donde a su vez se ha supuesto que el potencial de interacción sólo depende de la diferencia de las posiciones entre ambos electrones. Esto permite hacer una separación de la función de onda en las coordenadas de el centro de masa y la masa reducida

$$\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \quad \text{y} \quad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad (2.20)$$

entonces  $\hat{H}$  se reescribe como

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{4m}\nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{m}\nabla_{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}). \quad (2.21)$$

Por lo que separando la función de onda como  $\psi(r_1, r_2) = \Phi(\vec{R})\phi(\vec{r})$  obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{4m}\nabla_{\vec{R}}^2\Phi(\vec{R}) = E_{cm}\Phi(\vec{R}) \quad \text{y} \quad -\frac{\hbar^2}{m}\nabla_{\vec{r}}^2\phi(\vec{r}) + V(\vec{r})\phi(\vec{r}) = \epsilon\phi(\vec{r}), \quad (2.22)$$

donde se observa que la función de onda del centro de masa sigue la ecuación de movimiento de una partícula libre, es decir  $\Phi(\vec{R}) = \Omega^{-1/2} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{R})$ , entonces

$$E = \frac{\hbar^2 q^2}{4m} + \epsilon. \quad (2.23)$$

Como buscamos el nuevo estado base con el par de electrones añadido al mar de Fermi,  $E$  puede minimizarse aún más exigiendo  $\vec{q} = \vec{0}$ .

Para obtener soluciones analíticas, L. Copper aproximó el potencial de interacción (2.15) como sigue [Cooper, 1956]

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'} = \begin{cases} -V, & \text{si } \vec{k}, \vec{k}' \in \Gamma \\ 0, & \text{cualquier otro caso} \end{cases} \quad (2.24)$$

donde

$$\Gamma = \left\{ \vec{k} : E_F < \frac{\hbar^2 k^2}{2m} < E_F + \hbar\omega_D \right\} \quad (2.25)$$

y  $\omega_D$  es la frecuencia máxima que pueden alcanzar los fonones (frecuencia de Debye) en el sólido. Para obtener la energía de interacción, trabajaremos en el espacio de momentos, lo cual se logra haciendo la transformada de Fourier de la función de onda

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{k > k_F} c(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (2.26)$$

donde  $\Omega$  es el volumen del sistema en el espacio real y se ha usado  $k > k_F$  ya que el estado de los electrones están fuera de la esfera de Fermi. Sustituyendo (2.26) en (2.22)

$$\sum_{k > k_F} \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{m} c(\vec{k}) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} + \sum_{k > k_F} c(\vec{k}) V(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{\Omega}} = E \sum_{k > k_F} c(\vec{k}) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{\sqrt{\Omega}}, \quad (2.27)$$

multiplicando ambos miembros por  $\Omega^{-1/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ , integrando sobre todo el volumen y usando la propiedad de ortonormalidad de las funciones de onda planas, obtenemos

$$\frac{\hbar^2 k^2}{m} c(\vec{k}) + \sum_{k' > k_F} c(\vec{k}') V_{\vec{k}, \vec{k}'} = E c(\vec{k}), \quad (2.28)$$

donde  $V_{\vec{k}, \vec{k}'}$  es la transformada de Fourier del potencial, definida como

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} V(\vec{r}) e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\cdot\vec{r}} d^3\vec{r}. \quad (2.29)$$

Sustituyendo el potencial propuesto (2.24) en la ecuación (2.28), se obtiene

$$\left( E - \frac{\hbar^2 k^2}{m} \right) c(\vec{k}) = -V \sum_{\vec{k}' \in \Gamma} c(\vec{k}'). \quad (2.30)$$

Dividiendo la ecuación (2.30) entre el factor  $(E - \hbar^2 k^2/m)$  y sumando sobre  $\vec{k} \in \Gamma$

$$\sum_{\vec{k} \in \Gamma} c(\vec{k}) = \sum_{\vec{k} \in \Gamma} V \left( \frac{\hbar^2 k^2}{m} - E \right)^{-1} \sum_{\vec{k}' \in \Gamma} c(\vec{k}') \Rightarrow \sum_{\vec{k} \in \Gamma} V \left( \frac{\hbar^2 k^2}{m} - E \right)^{-1} = 1 \quad (2.31)$$

Ahora sumando sobre el el espectro de energías en el rango permitido por la condición (2.24) y empleando la densidad de estados por espín para electrones libres en 3 dimensiones [Kittel, 1996]

$$g(\epsilon) = \frac{\Omega(2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^2} \epsilon^{1/2}, \quad (2.32)$$

se obtiene

$$V \frac{\Omega(2m)^{3/2}}{4\pi^2 \hbar^3} \underbrace{\int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{\epsilon^{1/2}}{2\epsilon - E} d\epsilon}_I = 1. \quad (2.33)$$

Para efectuar la integral  $I$  de (2.33) aplicamos el cambio de variable  $z = (2\epsilon/E)^{1/2}$  y se tiene

$$I = \sqrt{\frac{E}{2}} \int_{\sqrt{2E_F/E}}^{\sqrt{2(E_F + \hbar\omega_D)/E}} \frac{z^2}{z^2 - 1} dz = \sqrt{\frac{E}{2}} \left[ z + \frac{1}{2} \ln \left( \frac{z-1}{z+1} \right) \right] \Big|_{\sqrt{2E_F/E}}^{\sqrt{2(E_F + \hbar\omega_D)/E}}, \quad (2.34)$$

donde observamos que para que el logaritmo de (2.34) esté bien definido, es necesario que  $z > 1$ , lo cual se cumple si

$$2E_F/E > 1 \Rightarrow E < 2E_F. \quad (2.35)$$

Esto implica que la energía del estado de dos electrones es menor que la energía que tendrían ambos electrones si se moviesen de forma independiente como ondas planas de vector de onda opuesto, es decir, forman un estado ligado.

### 2.3. La teoría BCS

El éxito del modelo propuesto por Cooper sugiere fuertemente que el estado base de los electrones debe estar constituido por pares ligados. Una función de  $N$  pares de electrones en singuletes y con vectores de onda opuestos tiene la forma

$$|\Psi_{2N}\rangle = \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} \dots \sum_{\vec{k}_N} g_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_N} \hat{c}_{\vec{k}_1 \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}_1 \downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}_2 \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}_2 \downarrow}^\dagger \dots \hat{c}_{\vec{k}_N \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}_N \downarrow}^\dagger |0\rangle. \quad (2.36)$$

J. Bardeen, L. Cooper y J. R. Schrieffer (BCS) propusieron un estado multipartícula alternativo a (2.36) que permitía considerar una cantidad no fija de partículas al trabajar en el ensamble gran canónico [Bardeen, 1957]. El estado base BCS es una función de prueba con parámetros variacionales sujetos a la condición de mínima energía

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_k (u_{\vec{k}} + \nu_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle, \quad (2.37)$$

donde  $\nu_{\vec{k}}$  y  $u_{\vec{k}}$  son coeficientes reales que representan la amplitud de probabilidad de tener al par  $\hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle$  ocupado o desocupado respectivamente. A su vez, dichos parámetros están constreñidos por la condición de normalización  $\langle \Psi_{BCS} | \Psi_{BCS} \rangle = 1$ , con lo cual obtenemos

$$u_{\vec{k}}^2 + \nu_{\vec{k}}^2 = 1. \quad (2.38)$$

Para determinar explícitamente  $u_{\vec{k}}$  y  $\nu_{\vec{k}}$  debemos usar el hecho de que queremos minimizar la energía. Como el número de partículas no es fijo, se debe imponer la restricción de que su promedio sí lo es. Dicho esto tenemos que minimizar el valor esperado de

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \mu \hat{N}, \quad (2.39)$$

donde

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \hat{c}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma'} V_{\vec{q}} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}', \sigma'} \hat{c}_{\vec{k}, \sigma}, \quad (2.40)$$

$\mu$  es el potencial químico y  $\hat{N} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \hat{c}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \sigma}$  es el operador de número.

Nos restringimos ahora a la parte de interacción del Hamiltoniano que contribuye a la superconductividad, es decir, mantenemos sólo la parte atractiva que conlleva la formación de pares de Cooper con espín y momento opuesto, por lo que nuestro Hamiltoniano reducido queda como

$$\hat{H}_R = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} = \hat{K} + \hat{H}_{int}, \quad (2.41)$$

donde  $\xi_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m - \mu$ . Por otro lado, el valor esperado de la energía del estado base viene dado por

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_R | \Psi_{BCS} \rangle \\ &= \langle \Psi_{BCS} | \hat{K} | \Psi_{BCS} \rangle + \langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_{int} | \Psi_{BCS} \rangle. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Los valores esperados de  $\hat{K}$  y  $\hat{H}_{int}$  son evaluados en el Apéndice A obteniendo

$$\langle \Psi_{BCS} | \hat{K} | \Psi_{BCS} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2 \xi_{\mathbf{k}}^2 \quad (2.43)$$

y

$$\langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_{int} | \Psi_{BCS} \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}}^* \nu_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}^*. \quad (2.44)$$

sustituir (2.43) y (2.44) en (2.42) y usar la condición de normalización (2.38), podemos proceder a minimizar el valor de la energía. Los cálculos se pueden simplificar aún más si introducimos la condición (2.38) en la expresión de  $E$  vía el cambio de variable

$$u_{\mathbf{k}} = \cos \theta_{\mathbf{k}}, \quad \nu_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}}, \quad (2.45)$$

y así obtenemos

$$E = \langle \hat{H}_R \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \sin^2 \theta_{\mathbf{k}} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}. \quad (2.46)$$

Al minimizar (2.46) respecto a los parámetros  $\theta_{\mathbf{k}}$  se obtiene

$$\frac{\partial E}{\partial \theta_{\mathbf{k}}} = 2\xi_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\mathbf{k}} + \cos 2\theta_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'} = 0, \quad (2.47)$$

donde se ha usado que  $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}}$ . De lo anterior, podemos concluir que

$$\xi_{\mathbf{k}} \tan 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}, \quad (2.48)$$

la cual nos permite definir la brecha energética superconductor como

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'} = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} \nu_{\mathbf{k}'}. \quad (2.49)$$

Empleando el potencial de Cooper (2.24), (2.49) se convierte en

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \Delta, & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D \\ 0, & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_D \end{cases}, \quad (2.50)$$

donde  $\Delta \equiv V \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} \nu_{\mathbf{k}'}$  y al sustituir en (2.48) se tiene

$$\begin{cases} \tan 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta}{\xi_{\mathbf{k}}} \\ \sin 2\theta_{\mathbf{k}} = 2u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \\ \cos 2\theta_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}^2 - \nu_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \end{cases}, \quad (2.51)$$

lo cual a su vez nos permite concluir que

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \right) \quad \text{y} \quad \nu_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \right). \quad (2.52)$$

De la definición de  $\Delta$  y de la segunda ecuación de (2.51) podemos observar que

$$\Delta = \frac{V}{2} \sum_{\vec{k} \in \Gamma} \frac{\Delta}{\sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta^2}}, \quad (2.53)$$

lo cual reduce la condición de autoconsistencia a

$$1 = \frac{V}{2} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{\sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta^2}} = \frac{V}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{g(\xi) d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}. \quad (2.54)$$

Para la mayoría de los metales  $\hbar\omega_D \ll E_F$  [Ashcroft, 1976], lo cual nos permite considerar la densidad de estados (2.32) como constante a lo largo del intervalo de integración, obteniendo así

$$\frac{1}{g(0)V} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{(\Delta^2 + \xi^2)^{1/2}} = \sinh^{-1} \frac{\hbar\omega_D}{\Delta}, \quad (2.55)$$

así

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh(1/g(0)V)} \approx 2\hbar\omega_D e^{-1/g(0)V}. \quad (2.56)$$

donde la última expresión es válida en el límite de acoplamiento débil  $g(0)V \ll 1$ .

## 2.4. Excitaciones elementales: transformación de Bogoliubov-Valantin

Consideremos un estado excitado, el cual consiste en el estado base sin el par  $\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger |0\rangle$  más un electron no apareado en el estado  $|\mathbf{k}, \uparrow\rangle$ ,

$$|\psi_{\mathbf{k}\uparrow}\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}'} + \nu_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger) |0\rangle. \quad (2.57)$$

Para la energía cinética, basta con usar la expresión (2.43) sin considerar el término  $\mathbf{k}$  en la suma y añadiendo la energía del electrón individual  $\xi_{\mathbf{k}}$ ,

$$\langle \psi_{\mathbf{k},\uparrow} | \hat{H}_0 | \psi_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle = \xi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} 2\nu_{\mathbf{k}'}^2 \xi_{\mathbf{k}'} = \xi_{\mathbf{k}}(1 - 2\nu_{\mathbf{k}}^2) + \sum_{\mathbf{k}'} 2\nu_{\mathbf{k}'}^2 \xi_{\mathbf{k}'}. \quad (2.58)$$

Mientras que para la energía potencial, usamos (2.44) sin considerar los términos con  $\mathbf{k}$  en la doble suma,

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\mathbf{k},\uparrow} | \hat{V} | \psi_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle &= \sum_{\substack{\mathbf{q} \neq \mathbf{q}' \\ \mathbf{q}, \mathbf{q}' \neq \mathbf{k}}} V_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} u_{\mathbf{q}} \nu_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} \nu_{\mathbf{q}'} = \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} u_{\mathbf{q}} \nu_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} \nu_{\mathbf{q}'} - 2u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} \nu_{\mathbf{q}} \\ &= \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{q}'} V_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} u_{\mathbf{q}} \nu_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} \nu_{\mathbf{q}'} + 2u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Por lo que al sumar las expresiones (2.58) y (2.59), y usar (2.51) obtenemos que la energía del estado excitado es  $|\psi_{\mathbf{k},\uparrow}\rangle$  es

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\mathbf{k},\uparrow} | \hat{H}_R | \psi_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle &= \xi_{\mathbf{k}}(1 - 2\nu_{\mathbf{k}}^2) - 2u_{\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} + E_0 \\ &= \xi_{\mathbf{k}} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \right] + \frac{\Delta^2}{E_{\mathbf{k}}} + E_0 = E_{\mathbf{k}} + E_0, \end{aligned} \quad (2.60)$$

donde  $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}$ . Es decir,  $\langle \psi_{\mathbf{k},\uparrow} | \hat{H}_R | \psi_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle$  es la energía del estado base  $E_0$  más el término  $E_{\mathbf{k}}$ , por lo que la energía mínima de excitación es  $\Delta$ , lo cual indica que el espectro de excitación tiene una brecha.

El efecto de aplicar los operadores  $\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger$  y  $\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}$  sobre el estado base es

$$\begin{aligned} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger | \Psi_{BCS} \rangle &= \left( u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger + \nu_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}'} + \nu_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger \right) | \phi_0 \rangle \\ &= u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}'} + \nu_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger \right) | \phi_0 \rangle = u_{\mathbf{k}} | \Psi_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle, \end{aligned} \quad (2.61)$$

y

$$\begin{aligned} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} | \Psi_{BCS} \rangle &= \left( u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} + \nu_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}'} + \nu_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger \right) | \phi_0 \rangle \\ &= -\nu_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}'} + \nu_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger \right) | \phi_0 \rangle = -\nu_{\mathbf{k}} | \Psi_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle. \end{aligned} \quad (2.62)$$

De forma similar, se puede observar que

$$\begin{aligned} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger | \Psi_{BCS} \rangle &= u_{\mathbf{k}} | \Psi_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle \\ \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} | \Psi_{BCS} \rangle &= \nu_{\mathbf{k}} | \Psi_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Multiplicando (2.61) por  $u_{\mathbf{k}}$  y (2.62) por  $-\nu_{\mathbf{k}}$ , además sumando ambos resultados, se tiene

$$(u_{\mathbf{k}}\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger - \nu_{\mathbf{k}}\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow})|\Psi_{BCS}\rangle = (u_{\mathbf{k}}^2 + \nu_{\mathbf{k}}^2)|\Psi_{\mathbf{k},\uparrow}\rangle = |\Psi_{\mathbf{k},\uparrow}\rangle. \quad (2.64)$$

Repitiendo lo anterior con las dos ecuaciones de (2.63), obtenemos

$$(u_{\vec{k}}\hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger - \nu_{\vec{k}}\hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger)|\Psi_{BCS}\rangle = (u_{\vec{k}}\nu_{\vec{k}} - \nu_{\vec{k}}u_{\vec{k}})|\Psi_{-\vec{k},\downarrow}\rangle = 0, \quad (2.65)$$

o bien  $\hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger|\Psi_{BCS}\rangle = |\Psi_{\vec{k},\uparrow}\rangle$  y  $\hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}|\Psi_{BCS}\rangle = 0$ , donde

$$\hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \equiv u_{\vec{k}}\hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger - \nu_{\vec{k}}\hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}. \quad (2.66)$$

Análogamente se puede probar que  $\hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger|\Psi_{BCS}\rangle = |\Psi_{\vec{k},\downarrow}\rangle$  y  $\hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}|\Psi_{BCS}\rangle = 0$ , donde

$$\hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \equiv u_{\vec{k}}\hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger + \nu_{\vec{k}}\hat{c}_{\vec{k},\uparrow}, \quad (2.67)$$

es decir, el par de operadores  $\hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger$  ( $\hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}$ ),  $\hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger$  ( $\hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}$ ) juegan el rol de operadores de creación (aniquilación) de cuasipartículas y el asociado ket sin cuasipartículas ( $|\Psi_{BCS}\rangle$ ) es el estado base superconductor.

Se puede interpretar a  $\hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger$  como la superposición de un electrón en el estado  $|\vec{k},\uparrow\rangle$  con amplitud de probabilidad  $u_{\vec{k}}$  y un hueco en el estado  $|\vec{k},\downarrow\rangle$  con amplitud de probabilidad  $\nu_{\vec{k}}$ .

Al aplicar la aproximación de campo medio de pares (Apéndice C), el hamiltoniano (2.41) se reduce a

$$\begin{aligned} \hat{H} - \mu\hat{N} &\approx \sum_{\vec{k},\sigma} \xi_{\vec{k}}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},\sigma} + \sum_{\vec{k},\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} \left( \langle \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow} \rangle \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger + \langle \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \rangle \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow} \right) \\ &- \sum_{\vec{k},\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} \langle \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow} \rangle = \hat{H}_{eff}. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Posteriormente reescribimos los operadores  $\hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger$ ,  $\hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger$  en términos de los operadores  $\hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger$ ,  $\hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger$  y buscamos qué condición deben satisfacer los coeficientes  $u_{\vec{k}}$ ,  $\nu_{\vec{k}}$  para que el hamiltoniano pueda ser diagonalizado, conociendo el hecho de que deben satisfacer la condición de normalización (2.38). De las ecuaciones (2.66) y (2.67) escribimos la transformación inversa:

$$\hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger = u_{\vec{k}}\hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger + \nu_{\vec{k}}\hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}, \quad \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger = u_{\vec{k}}\hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger - \nu_{\vec{k}}\hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow} \quad (2.69)$$

y observamos que

$$\begin{aligned} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},\uparrow} &= u_{\vec{k}}^2 \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow} + \nu_{\vec{k}}^2 \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger - u_{\vec{k}}\nu_{\vec{k}} \left( \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger + \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow} \right), \\ \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow} &= u_{\vec{k}}^2 \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow} + \nu_{\vec{k}}^2 \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow} \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger - u_{\vec{k}}\nu_{\vec{k}} \left( \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger + \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow} \right), \\ \hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger &= u_{\vec{k}}^2 \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger - \nu_{\vec{k}}^2 \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow} + u_{\vec{k}}\nu_{\vec{k}} \left( \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow} - \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \right), \\ \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},\uparrow} &= u_{\vec{k}}^2 \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow} - \nu_{\vec{k}}^2 \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger + u_{\vec{k}}\nu_{\vec{k}} \left( \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow} - \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \right). \end{aligned} \quad (2.70)$$

Así, buscamos que (2.68) quede de la forma

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\vec{k},\sigma} E_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{\vec{k},\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k},\sigma}, \quad (2.71)$$

donde  $E_0$  es la energía del vacío de cuasipartículas y  $E_{\vec{k}}$  es la energía de excitación de los Bogoliubovs. Si ahora calculamos el promedio térmico  $\langle \hat{\gamma}_{\vec{k},\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}',\sigma'} \rangle$  aludiendo que  $\hat{H}$  tiene la forma de (2.70), observamos que dichos operadores obedecen las relaciones de espectación de Fermi

$$\langle \gamma_{\vec{k},\sigma}^\dagger \gamma_{\vec{k}',\sigma'} \rangle = \frac{1}{e^{E_{\vec{k},\sigma}/k_B T} + 1} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} = f_{\vec{k},\sigma} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (2.72)$$

$$\langle \gamma_{\vec{k},\sigma} \gamma_{\vec{k},\sigma}^\dagger \rangle = 1 - \langle \gamma_{\vec{k},\sigma}^\dagger \gamma_{\vec{k},\sigma} \rangle = 1 - f_{\vec{k}}, \quad (2.73)$$

$$\langle \hat{\gamma}_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger \rangle = \langle \hat{\gamma}_{\vec{k}\sigma} \hat{\gamma}_{\vec{k}'\sigma'} \rangle = 0, \quad (2.74)$$

donde

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{Tr\{e^{-\beta \hat{H}} \hat{O}\}}{Tr\{e^{-\beta \hat{H}}\}}, \quad (2.75)$$

con  $\beta = 1/k_B T$ . Los promedios térmicos de (2.74) son nulos ya que el hamiltoniano (2.71) conserva el número de cuasipartículas, no así el número de electrones como se aprecia en (2.70), por lo que

$$\langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle = u_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}} (1 - 2f_{\vec{k}}) = \langle \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \rangle \quad (2.76)$$

resultando en una nueva expresión para la brecha,

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} \langle \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \rangle = \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}\vec{k}'} u_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}'} (2f_{\vec{k}'} - 1). \quad (2.77)$$

Insertando las relaciones (2.70) y (2.77) en (2.68), el hamiltoniano efectivo queda como

$$\hat{H}_{eff} = E_0 + \hat{H}_D + \hat{H}_{ND}, \quad (2.78)$$

donde

$$E_0 = \sum_{\vec{k}} [2\xi_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}}^2 - \Delta_{\vec{k}} u_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}} (1 + 2f(E_{\vec{k}}))] \quad (2.79)$$

es el término independiente,

$$H_D = \sum_{\vec{k}} [\xi_{\vec{k}} (u_{\vec{k}}^2 - \nu_{\vec{k}}^2) + 2u_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}] \left( \hat{\gamma}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}\uparrow} + \hat{\gamma}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\vec{k}\downarrow} \right) \quad (2.80)$$

es la parte diagonal del hamiltoniano y

$$\hat{H}_{ND} = \sum_{\vec{k}} [-2\xi_{\vec{k}} u_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}} (u_{\vec{k}}^2 - \nu_{\vec{k}}^2)] \left( \hat{\gamma}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger + \hat{\gamma}_{\vec{k}\uparrow} \hat{\gamma}_{-\vec{k}\downarrow} \right) \quad (2.81)$$

es la parte no diagonal.

Al comparar (2.77) con (2.70) se obtienen las siguientes relaciones

$$E_{\vec{k}} \equiv \xi_{\vec{k}} (u_{\vec{k}}^2 - \nu_{\vec{k}}^2) + 2u_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} \quad (2.82)$$

y

$$u_{\vec{k}}^2 - \nu_{\vec{k}}^2 = \frac{2\xi_{\vec{k}}}{\Delta_{\vec{k}}} u_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}}. \quad (2.83)$$

Usando la propiedad de ortonormalidad  $u_{\vec{k}}^2 + \nu_{\vec{k}}^2 = 1$  se concluye que

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2}, \quad \Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k},\vec{k}'} \frac{1 - 2f(E_{\vec{k}'})}{2E_{\vec{k}'}} \Delta_{\vec{k}'}, \quad (2.84)$$

$$u_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right) \quad \text{y} \quad \nu_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right). \quad (2.85)$$

Ahora analizamos el comportamiento de la brecha energética empleando el potencial de Cooper

$$V_{\vec{k},\vec{k}'} = \begin{cases} -V & \text{si } |\xi_{\vec{k}}| \text{ y } |\xi_{\vec{k}'}| \leq \hbar\omega_D \\ 0 & \text{si } |\xi_{\vec{k}}| \text{ o } |\xi_{\vec{k}'}| \geq \hbar\omega_D \end{cases} \quad (2.86)$$

Así, la ecuación (2.82) puede ser escrita en la forma integral,

$$1 = V \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{g(\xi)d\xi}{2(\xi^2 + \Delta^2)^{1/2}} \tanh \frac{(\xi^2 + \Delta^2)^{1/2}}{2k_B T} \quad (2.87)$$

y empleando la aproximación  $\hbar\omega_D \ll E_F$ ,

$$1 = g(0)V \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{(\xi^2 + \Delta^2)^{1/2}} \tanh \frac{(\xi^2 + \Delta^2)^{1/2}}{2K_B T}. \quad (2.88)$$

En la temperatura de transición  $T_c$  el parámetro de orden se anula  $\Delta(T = T_c) = 0$ , es decir, la temperatura crítica es aquella que satisface

$$1 = g(0)V \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\xi} \tanh \frac{\xi}{2k_B T_c} = g(0)V \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}} \frac{dx}{x} \tanh(x). \quad (2.89)$$

En el límite de acoplamiento débil ( $g(0)V \ll 1$ ) se espera que  $k_B T_c \ll \hbar\omega_D$ , y como se muestra en el Apéndice C, la integral de (2.89) tiene el siguiente comportamiento asintótico

$$\int_0^z \frac{\tanh(x)}{x} dx = \ln \left( \frac{4e^\gamma}{\pi} z \right), \quad (2.90)$$

donde  $\gamma$  es la constante de Euler-Mascheroni ( $\gamma \approx 0.57721$ ). Así, al usar (2.90) en (2.89), se obtiene

$$k_B T_c = \frac{2e^\gamma}{\pi} \hbar\omega_D \exp \left( -\frac{1}{g(0)V} \right). \quad (2.91)$$

La dependencia del parámetro de orden  $\Delta$  como función de la temperatura se obtuvo numéricamente y se muestra en la Figura 2.1.

El calor específico se puede calcular a partir de la expresión de la entropía de Shannon

$$S = -2k_B \sum_{\vec{k}} [f_{\vec{k}} \ln f_{\vec{k}} + (1 - f_{\vec{k}}) \ln(1 - f_{\vec{k}})]. \quad (2.92)$$

El factor de 2 es para tomar en cuenta la degeneración por espín. Empleando la definición de la capacidad calorífica y (2.92), se tiene

$$C_V = T \frac{\partial S}{\partial T} = -2k_B T \sum_{\vec{k}} [\ln f_{\vec{k}} - \ln(1 - f_{\vec{k}})] \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial T}, \quad (2.93)$$

pero

$$\frac{f_{\vec{k}}}{1 - f_{\vec{k}}} = \exp \left( -\frac{E_{\vec{k}}}{k_B T} \right) \Rightarrow \ln f_{\vec{k}} - \ln(1 - f_{\vec{k}}) = -\frac{E_{\vec{k}}}{k_B T}, \quad (2.94)$$

mientras que

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial T} &= \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{e^{E_{\vec{k}}/k_B T} + 1} \right) = -\frac{e^{E_{\vec{k}}/k_B T}}{(1 + e^{E_{\vec{k}}/k_B T})^2} \left( \frac{1}{k_B T} \frac{dE_{\vec{k}}}{dT} - \frac{E_{\vec{k}}}{k_B T^2} \right) \\ &= -f_{\vec{k}}^2 \frac{1 - f_{\vec{k}}}{f_{\vec{k}}} \frac{1}{k_B} \left( \frac{\Delta}{T(\Delta^2 + \xi_{\vec{k}}^2)^{1/2}} \frac{d\Delta(T)}{dT} - \frac{\xi_{\vec{k}}}{T^2} \right) = \frac{f_{\vec{k}}(1 - f_{\vec{k}})}{k_B T^2 E_{\vec{k}}} \left( E_{\vec{k}}^2 - T\Delta \frac{d\Delta}{dT} \right). \end{aligned} \quad (2.95)$$

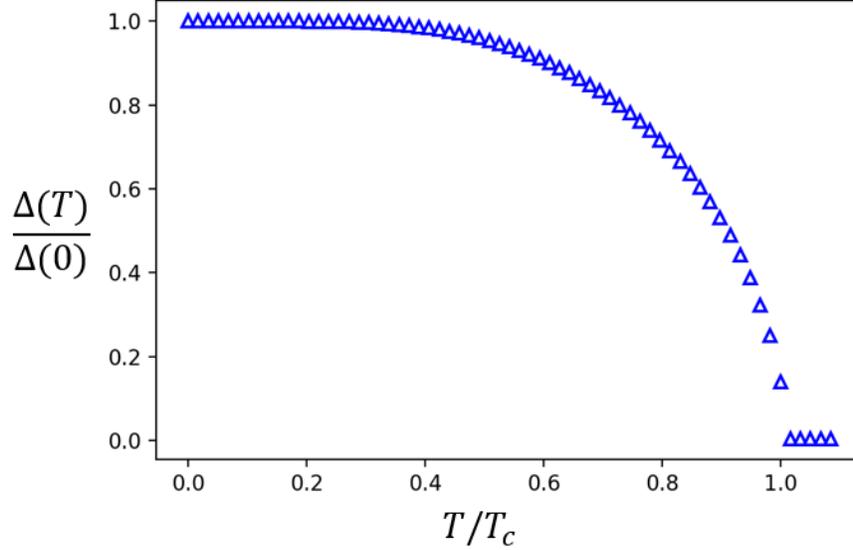


Figura 2.1: Dependencia de la brecha energética ( $\Delta$ ) de la temperatura ( $T$ ).

Reinsertando (2.95) en (2.92),

$$S = \frac{2}{k_B T^2} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}}) \left( E_{\vec{k}}^2 - T \Delta \frac{d\Delta}{dT} \right), \quad (2.96)$$

entonces

$$S = \frac{4g(0)}{k_B T^2} \int_0^{\hbar\omega_D} f(E)(1 - f(E)) \left( E^2 - T \Delta \frac{d\Delta}{dT} \right) d\epsilon. \quad (2.97)$$

A temperaturas muy por debajo de la temperatura crítica, podemos usar que  $f(E_{\vec{k}}) \ll 1$  y observando la Figura 2.1, también tenemos que  $d\Delta/dT \approx 0$  y que la contribución más importante a la integral es para energías de excitación muy cercanas a  $\Delta_0$  con lo que la región de integración más significativa es aquella para la cual  $\xi \ll \Delta_0$ . Por lo tanto, llegamos a que la capacidad calorífica a bajas temperaturas es aproximadamente igual a [Ketterson, 1999]

$$C_V \approx \frac{2g_0}{k_B T^2} \int_0^{\hbar\omega_D} e^{-(\xi^2 + \Delta^2)^{1/2}/k_B T} (\xi^2 + \Delta^2) d\xi. \quad (2.98)$$

Como  $\Delta \approx \Delta_0$  y  $\xi \ll \Delta_0$  tenemos que

$$C_v \approx \frac{2g_0 \Delta_0^2}{k_B T^2} \int_0^{\hbar\omega_D} \exp \left[ -\frac{\Delta_0}{k_B T} \left( 1 + \frac{\xi^2}{2\Delta_0^2} \right) \right] d\xi. \quad (2.99)$$

Por otro lado, se puede extender la integral hasta infinito ya que la contribución para energías mayores a  $\hbar\omega_D$  es despreciable, con lo que

$$\begin{aligned} C_v &\approx \frac{2g_0 \Delta_0^2}{k_B T^2} \exp \left( -\frac{\Delta_0}{k_B T} \right) \int_0^\infty \exp \left( \frac{-\xi^2}{2k_B T \Delta} \right) d\xi \\ &= k_B g_0 \Delta_0 (2\pi)^{1/2} \left( \frac{\Delta_0}{k_B T} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{\Delta_0}{k_B T} \right). \end{aligned} \quad (2.100)$$

Que es muy cercano al comportamiento esperado encontrado en los experimentos realizados por Corak, *et.al.* [Corak, 1956].

# Capítulo 3

## Vortices magnéticos en red cuadrada

La presencia de campo magnético externo o granos estructurales en superconductores revela las limitaciones del modelo homogéneo de gas de electrones presentado en la sección anterior. Para lidiar dichas inhomogeneidades espaciales, una alternativa es desarrollar teorías de superconductividad en el espacio real tal como el formalismo de Bogoliubov-de Gennes, el cual extiende la idea de las excitaciones a partir del estado base superconductor presentada en la sección (2.4) partiendo de un hamiltoniano dependiente de la posición, como se mostrará en la siguiente sección.

### 3.1. Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes

El hamiltoniano de un sistema de electrones interactuantes moviéndose en un potencial escalar  $\phi(\vec{r})$  y vectorial  $\vec{A}(\vec{r})$  en el lenguaje de segunda cuantización, está dado por

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}, \quad (3.1)$$

donde

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \int \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \hat{h}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) d^3r \quad (3.2)$$

con

$$\hat{h}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla + \frac{ie}{\hbar} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 - e\phi(\vec{r}) \quad (3.3)$$

y

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma \neq \sigma'} \iint V(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) d^3r d^3r' \\ &= \iint V(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\downarrow}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}) d^3r d^3r'. \end{aligned} \quad (3.4)$$

El operador  $\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r})$  crea un electrón en la posición  $\vec{r}$  con proyección de espín  $\sigma$  y satisface las relaciones de anticomutación de Fermi,

$$\{\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}')\} = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma, \sigma'}, \quad (3.5)$$

$$\{\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}')\} = \{\hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\} = 0. \quad (3.6)$$

En el presente trabajo, se supone que el potencial de interacción electrón-electrón (3.4) es de corto alcance [Ketterson, 258], es decir,

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = -V \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (3.7)$$

donde  $V > 0$  para describir una interacción atractiva.

Aplicando la aproximación de campo medio para los pares de Cooper a  $\hat{H}_{int}$ , se tiene [Bruus, 2002]

$$\hat{H}_{int}^{MF} = \int d^3\vec{r} \left[ \Delta(\vec{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) + \Delta^*(\vec{r}) \hat{\psi}_{\downarrow}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}) \right] - \int d^3\vec{r} \Delta(\vec{r}) \langle \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) \rangle \quad (3.8)$$

donde

$$\Delta(\vec{r}) \equiv -V \langle \hat{\psi}_\downarrow(\vec{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\vec{r}) \rangle. \quad (3.9)$$

Reescribimos la transformación de Bogoliubov (2.69) en el espacio real,

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_\uparrow^\dagger(\vec{r}) &= \sum_n \left[ u_n^*(\vec{r}) \hat{\gamma}_{n\uparrow}^\dagger - \nu_n(\vec{r}) \hat{\gamma}_{n\downarrow} \right], & \hat{\psi}_\downarrow^\dagger(\vec{r}) &= \sum_n \left[ u_n^*(\vec{r}) \hat{\gamma}_{n\downarrow}^\dagger + \nu_n(\vec{r}) \hat{\gamma}_{n\uparrow} \right], \\ \hat{\psi}_\uparrow(\vec{r}) &= \sum_n \left[ u_n(\vec{r}) \hat{\gamma}_{n\uparrow} - \nu_n^*(\vec{r}) \hat{\gamma}_{n\downarrow}^\dagger \right], & \hat{\psi}_\downarrow(\vec{r}) &= \sum_n \left[ u_n(\vec{r}) \hat{\gamma}_{n\downarrow} + \nu_n^*(\vec{r}) \hat{\gamma}_{n\uparrow}^\dagger \right], \end{aligned} \quad (3.10)$$

donde de nuevo, los operadores  $\hat{\gamma}_{n\sigma}$  satisfacen las relaciones de anticonmutación de Fermi

$$\{ \hat{\gamma}_{n\sigma}^\dagger, \hat{\gamma}_{n'\sigma'} \} = \delta_{n,n'} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (3.11)$$

y

$$\{ \hat{\gamma}_{n\sigma}^\dagger, \hat{\gamma}_{n',\sigma'}^\dagger \} = \{ \hat{\gamma}_{n\sigma}, \hat{\gamma}_{n',\sigma'} \} = 0. \quad (3.12)$$

Lo anterior se cumple debido a que cualquier transformación unitaria preserva el álgebra. Exigimos que el hamiltoniano de campo medio  $\hat{H}_{MF} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}^{MF}$  represente un hamiltoniano de un solo cuerpo y diagonal para las cuasipartículas, es decir, se busca que bajo la transformación (3.10), el hamiltoniano  $\hat{H}_{MF}$  pueda ser escrito como

$$\hat{H}_{MF} = E_0 + \sum_n E_n \hat{\gamma}_{n\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{n\sigma}. \quad (3.13)$$

Para derivar el sistema de ecuaciones que deben satisfacer las amplitudes  $u_n$  y  $\nu_n$ , de manera que  $\hat{H}_{MF}$  tome la forma (3.13), primero nos apoyamos en las siguientes relaciones de anticonmutación (Apéndice C),

$$[\hat{\psi}_\uparrow(\vec{r}), \hat{H}_{MF}] = \hat{h}(\vec{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\vec{r}) + \Delta(\vec{r}) \hat{\psi}_\downarrow^\dagger(\vec{r}) \quad (3.14)$$

y

$$[\hat{\psi}_\downarrow(\vec{r}), \hat{H}_{MF}] = \hat{h}(\vec{r}) \hat{\psi}_\downarrow(\vec{r}) + \Delta(\vec{r}) \hat{\psi}_\uparrow^\dagger(\vec{r}). \quad (3.15)$$

Por otro lado, usando (3.13), notamos que

$$[\hat{\gamma}_{n,\sigma}^\dagger, \hat{H}_{MF}] = -E_n \hat{\gamma}_{n,\sigma}^\dagger, \quad [\hat{\gamma}_{n,\sigma}, \hat{H}_{MF}] = -E_n \hat{\gamma}_{n,\sigma}. \quad (3.16)$$

Sustituyendo la transformación (3.10) en (3.14) y (3.15), y empleando (3.13) se tiene que

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_\uparrow(\vec{r}), \hat{H}_{MF}] &= \hat{h}(\vec{r}) \hat{\psi}_\uparrow(\vec{r}) + \Delta(\vec{r}) \hat{\psi}_\downarrow^\dagger(\vec{r}) \\ &= \sum_n \left( \hat{h}(\vec{r}) u_n(\vec{r}) + \Delta(\vec{r}) \nu_n(\vec{r}) \right) \hat{\gamma}_{n,\uparrow} + \sum_n \left( -\hat{h}(\vec{r}) \nu_n^*(\vec{r}) + \Delta(\vec{r}) u_n^*(\vec{r}) \right) \hat{\gamma}_{n,\downarrow}^\dagger. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Del mismo modo, sustituyendo la transformación (3.10) en el lado izquierdo de (3.17) y empleando (3.13)

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_\uparrow(\vec{r}), \hat{H}_{MF}] &= \sum_n \left( u_n(\vec{r}) [\hat{\gamma}_{n\uparrow}, \hat{H}_{MF}] - \nu_n^*(\vec{r}) [\hat{\gamma}_{n\downarrow}^\dagger, \hat{H}_{MF}] \right) \\ &= \sum_n \left( u(\vec{r}) E_n \hat{\gamma}_{n\uparrow} + \nu_n^*(\vec{r}) E_n \hat{\gamma}_{n,\downarrow}^\dagger \right). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Como los operadores  $\hat{\gamma}_{n,\sigma}^\dagger$  ( $\hat{\gamma}_{n,\sigma}$ ) crean (destruyen) estados ortonormales, igualando (3.17) y (3.18), y agrupando términos iguales, entonces, los coeficientes de  $\hat{\gamma}_{n,\uparrow}$  y  $\hat{\gamma}_{n,\downarrow}^\dagger$  deben ser igual a cero, para todo  $n$ , con lo cual obtenemos el conjunto de ecuaciones autoconsistentes de Bogoliubov,

$$\begin{cases} \hat{h}(\vec{r})u_n(\vec{r}) + \Delta(\vec{r})\nu_n(\vec{r}) = E_n u_n(\vec{r}) \\ \Delta^*(\vec{r})u_n(\vec{r}) - \hat{h}^*(\vec{r})\nu_n(\vec{r}) = E_n \nu_n(\vec{r}) \end{cases} \quad (3.19)$$

Definiendo

$$\hat{\Omega} = \begin{pmatrix} \hat{h}(\vec{r}) & \Delta(\vec{r}) \\ \Delta^*(\vec{r}) & -\hat{h}^*(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

(3.19) puede reescribirse como la siguiente ecuación de eigenvalores

$$\hat{\Omega} \begin{pmatrix} u_n(\vec{r}) \\ \nu_n(\vec{r}) \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} u_n(\vec{r}) \\ \nu_n(\vec{r}) \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Cabe mencionar que  $\hat{h}(\vec{r})$  es un operador diferencial que relaciona la solución en  $\vec{r}$  con las soluciones en una vecindad de  $\vec{r}$ , por lo que (3.21) no se puede resolver localmente.

Como los operadores  $\hat{\gamma}_{n,\sigma}^\dagger$  crean cuasipátículas fermiónicas, se satisface que

$$\langle \hat{\gamma}_{n,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{n,\sigma} \rangle = f(E_n) \equiv \frac{1}{e^{E_n/k_B T} + 1} \quad (3.22)$$

y con ello podemos obtener explícitamente  $\Delta(\vec{r})$  en términos de  $u_n(\vec{r})$ ,  $\nu_n(\vec{r})$  usando (3.10) y (3.22)

$$\begin{aligned} \Delta(\vec{r}) &= -V \left\langle \sum_n \left( u_n(\vec{r}) \hat{\gamma}_{n,\downarrow} + \nu_n^*(\vec{r}) \hat{\gamma}_{n,\uparrow}^\dagger \right) \sum_m \left( u_m(\vec{r}) \hat{\gamma}_{m,\uparrow} - \nu_m^*(\vec{r}) \hat{\gamma}_{m,\downarrow}^\dagger \right) \right\rangle \\ &= -V \sum_{n,m} \left( u_n(\vec{r}) u_m(\vec{r}) \langle \hat{\gamma}_{n,\downarrow} \hat{\gamma}_{m,\uparrow} \rangle - u_n(\vec{r}) \nu_m^*(\vec{r}) \langle \hat{\gamma}_{n,\downarrow} \hat{\gamma}_{m,\downarrow}^\dagger \rangle \right. \\ &\quad \left. + \nu_n^*(\vec{r}) u_m(\vec{r}) \langle \hat{\gamma}_{n,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{m,\uparrow} \rangle - \nu_n^*(\vec{r}) \nu_m^*(\vec{r}) \langle \hat{\gamma}_{n,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{m,\downarrow}^\dagger \rangle \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

Usando los resultados del apéndice D, concluimos que

$$\Delta(\vec{r}) = V \sum_n \nu_n^*(\vec{r}) u_n(\vec{r}) \left( 1 - 2f(E_n) \right). \quad (3.24)$$

### 3.2. Transformación de norma

El potencial vectorial  $\vec{A}(\vec{r})$  que da lugar al campo magnético del sistema en (3.7) no es único, ya que depende de la elección de norma. A continuación discutiremos la invarianza de la solución de las ecuaciones BdG ante una transformación de norma.

Si  $u_n(\vec{r})$  y  $\nu_n(\vec{r})$  es el conjunto de soluciones a las ecuaciones (3.19) con potencial magnético dado por  $\vec{A}(\vec{r})$ , entonces, el conjunto de soluciones  $u'_n(\vec{r})$ ,  $\nu'_n(\vec{r})$  para el potencial  $\vec{A}'(\vec{r})$  que resulta de transformar a  $\vec{A}'(\vec{r})$  vía

$$\vec{A}'(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r}) + \nabla\chi(\vec{r}), \quad (3.25)$$

es

$$\begin{cases} u'_n(\vec{r}) = u_n(\vec{r}) \exp\left(\frac{ie}{\hbar}\chi(\vec{r})\right) \\ \nu'_n(\vec{r}) = \nu_n(\vec{r}) \exp\left(-\frac{ie}{\hbar}\chi(\vec{r})\right) \end{cases}, \quad (3.26)$$

lo cual conduce a la transformación del parámetro de orden,

$$\Delta'(\vec{r}) = V \sum_n u'_n(\vec{r}) \nu'_n{}^*(\vec{r}) (1 - 2f_n) = \Delta(\vec{r}) \exp\left(\frac{2ie}{\hbar} \chi(\vec{r})\right). \quad (3.27)$$

Las ecuaciones (3.57) y (3.27) se pueden verificar como sigue: Sea  $\phi(\vec{r})$  una función arbitraria, entonces

$$\left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} \vec{A}(\vec{r})\right) e^{\frac{ie}{\hbar} \chi(\vec{r})} \phi(\vec{r}) = e^{\frac{ie}{\hbar} \chi(\vec{r})} \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} (\vec{A}(\vec{r}) - \nabla \chi)\right) \phi(\vec{r}), \quad (3.28)$$

lo cual implica que

$$\left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} \vec{A}(\vec{r})\right)^2 e^{\frac{ie}{\hbar} \chi(\vec{r})} \phi(\vec{r}) = \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} \vec{A}(\vec{r})\right) \cdot e^{\frac{ie}{\hbar} \chi(\vec{r})} \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} (\vec{A}(\vec{r}) - \nabla \chi)\right) \phi(\vec{r}). \quad (3.29)$$

Considere ahora  $\left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} (\vec{A}(\vec{r}) - \nabla \chi)\right) \phi(\vec{r})$  como la función  $\phi(\vec{r})$  en (3.28), usando de nuevo (3.28), obtenemos

$$\begin{aligned} & \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} \vec{A}(\vec{r})\right)^2 e^{\frac{ie}{\hbar} \chi(\vec{r})} \phi(\vec{r}) \\ &= e^{\frac{ie}{\hbar} \chi(\vec{r})} \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} (\vec{A}(\vec{r}) - \nabla \chi)\right) \cdot \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} (\vec{A}(\vec{r}) - \nabla \chi)\right) \phi(\vec{r}) \\ &= e^{\frac{ie}{\hbar} \chi(\vec{r})} \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} (\vec{A}(\vec{r}) - \nabla \chi)\right)^2 \phi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Conjugando ambos miembros de (3.30), observamos que

$$\left(\nabla + \frac{ie}{\hbar} \vec{A}(\vec{r})\right)^2 e^{-\frac{ie}{\hbar} \chi(\vec{r})} \phi(\vec{r}) = e^{-\frac{ie}{\hbar} \chi(\vec{r})} \left(\nabla + \frac{ie}{\hbar} (\vec{A}(\vec{r}) - \nabla \chi)\right)^2 \phi(\vec{r}), \quad (3.31)$$

en su miembro derecho siempre tiene  $\vec{A} - \nabla \chi$  en el término complejo, independientemente de si se usa la exponencial con signo positivo o negativo, por lo que sustituyendo  $\vec{A}'$ ,  $\Delta'$ ,  $u'_n$ ,  $\nu'_n$  en el miembro izquierdo de la primera ecuación de (3.19) obtenemos

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} \vec{A}'\right)^2 u'_n + \Delta' \nu'_n &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} \vec{A}'\right)^2 e^{ie\chi/\hbar} u_n + e^{2ie\chi/\hbar} \Delta e^{-ie\chi/\hbar} \nu_n \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} e^{ie\chi/\hbar} \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} (\vec{A}' - \nabla \chi)\right)^2 u_n + e^{ie\chi/\hbar} \Delta \nu_n \\ &= e^{ie\chi/\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar} (\vec{A}' - \nabla \chi)\right)^2 u_n + \Delta \nu_n \right] \\ &= e^{ie\chi/\hbar} E_n u_n = E_n u'_n. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Por lo tanto  $u'_n$  y  $\nu'_n$  son soluciones las ecuaciones BdG con  $\Delta'$  y  $\vec{A}'$ .

Cabe mencionar que las soluciones  $u'_n$  y  $\nu'_n$  no son únicas, puesto que cualquier variante de (3.57) con una fase adicional  $\theta$  independiente de la posición

$$u'(\vec{r}) \rightarrow e^{i\theta} u'(\vec{r}), \quad \nu'(\vec{r}) \rightarrow e^{-i\theta} \nu'(\vec{r}), \quad (3.33)$$

también satisface las ecuaciones BdG con el mismo parámetro de orden  $\Delta'$ . Como se verá en la siguiente sección, las condiciones a la frontera en  $u_n, \nu_n$  definen los posibles valores que puede tomar la fase  $\theta$ .

### 3.3. Teorema de Bloch Magnético

Como ya vimos, en un sólido superconductor tipo II existe la penetración del campo magnético en forma de vórtices en la fase de Abrikosov (o Shubnikov). Dichos vórtices forman una red periódica triangular (Figura 3.1), pero la diferencia energética entre dicha red y una red cuadrada es pequeña [James, 1969].

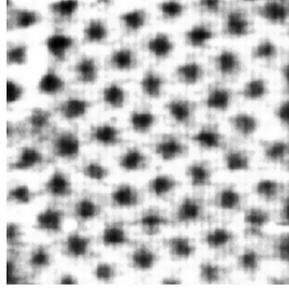


Figura 3.1: Visualización de la red de Abrikosov mediante efecto tunel para una muestra de NbSe<sub>2</sub> con un tamaño de 630×500 nm, a  $T = 4K$ . Los puntos en negro corresponden a los centros de los vórtices [Mangin, 2016].

Considérese la función de onda en 2D de un electrón que se mueve en una red cuadrada con campos eléctrico y magnético periódicos, de tal forma que la periodicidad del campo magnético es un múltiplo entero de la periodicidad del potencial eléctrico. Es decir, si

$$\phi(x + a, y) = \phi(x, y + a) = \phi(x, y) \quad (3.34)$$

entonces

$$\vec{B}(x + N_x a, y) = \vec{B}(x, y + N_y a) = \vec{B}(x, y) \quad (3.35)$$

con  $N_x, N_y \in \mathbb{N}$ . Es decir, la distribución de campo magnético forma una red periódica cuya celda unitaria magnética (CUM) tiene un tamaño de  $N_x a \times N_y a$ .

Se puede usar la simetría discreta del problema para estudiar  $\psi(\vec{r})$  en una celda unitaria magnética en lugar de hacerlo en todo el espacio. Un ejemplo de dicho enfoque sería el teorema de Bloch, pero su aplicación directa no es posible porque el operador  $\hat{h}(\vec{r})$  en (3.19) depende de  $\vec{A}(\vec{r})$  el cual no es necesariamente periódico. En efecto, considerérese un campo magnético uniforme que apunta en la dirección  $\hat{e}_z$  dado por  $\vec{B} = B_0 \hat{e}_z$ . Una elección del potencial  $\vec{A}(\vec{r})$  que satisfaga con  $\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$ , sería

$$\vec{A}(x, y) = (0, B_0 x, 0), \quad (3.36)$$

y obsérvese que

$$\vec{A}(x + N_x a, y) = (0, B_0 x + B_0 N_x a, 0) \neq \vec{A}(x, y). \quad (3.37)$$

Sin embargo, sabemos que cuando se modifica  $\vec{A}$  mediante un cambio de norma, la función de onda de un solo electrón se transforma adquiriendo una fase adicional como puede verse a través de (3.30)

$$\vec{A}(\vec{r}) \rightarrow \vec{A}'(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r}) + \nabla \chi(\vec{r}), \quad \psi(\vec{r}) \rightarrow \psi'(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) e^{\frac{ie}{\hbar} \chi(\vec{r})}. \quad (3.38)$$

Por otro lado, si bien es cierto que  $\vec{A}(x, y) \neq \vec{A}(x + N_x a, y)$ , sí se cumple que

$$\nabla \times \vec{A}(x, y) = \vec{B}(x, y) = \vec{B}(x + N_x a, y) = \nabla \times \vec{A}(x + N_x a, y), \quad (3.39)$$

en otras palabras,

$$\nabla \times \left( \vec{A}(x + N_x a, y) - \vec{A}(x, y) \right) = 0, \quad (3.40)$$

Por lo que

$$\vec{A}(x + N_x a, y) - \vec{A}(x, y) = \nabla \chi_x(x, y). \quad (3.41)$$

Y del mismo modo para  $y$

$$\vec{A}(x, y + N_y a) - \vec{A}(x, y) = \nabla \chi_y(x, y). \quad (3.42)$$

Lo anterior se puede escribir de forma más compacta como

$$\vec{A}(\vec{r} + \vec{R}_i) - \vec{A}(\vec{r}) = \nabla \chi_i(\vec{r}) \quad i = x, y \quad (3.43)$$

donde  $\vec{R}_i = N_i a \hat{e}_i$  para  $i = x, y$ . Es decir, el efecto de aplicar una traslación al potencial magnético es equivalente a aplicar una transformación de norma, lo cual nos permite usar (3.38) para definir los operadores de traslación magnéticos ( $\hat{T}_i^M$ ) como

$$\begin{cases} \hat{T}_x^M \psi(\vec{r}) = \exp\left(-\frac{ie}{\hbar} \chi_x(\vec{r})\right) \psi(\vec{r} + \vec{R}_x) \\ \hat{T}_y^M \psi(\vec{r}) = \exp\left(-\frac{ie}{\hbar} \chi_y(\vec{r})\right) \psi(\vec{r} + \vec{R}_y) \end{cases} \quad (3.44)$$

los cuales conmutan con  $\hat{h}(\vec{r})$ , ya que usando las ecuaciones (3.32) y (3.43) se tiene

$$\begin{aligned} \hat{h}(\vec{r}) \hat{T}_i^M \psi(\vec{r}) &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 - e\phi(\vec{r}) \right] e^{-ie\chi_i/\hbar} \psi(\vec{r} + \vec{R}_i) \\ &= e^{-ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar} \left( \vec{A}(\vec{r}) + \nabla \chi_i(\vec{r}) \right) \right)^2 - e\phi(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r} + \vec{R}_i) \\ &= e^{-ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar} \vec{A}(\vec{r} + \vec{R}_i) \right)^2 - e\phi(\vec{r} + \vec{R}_i) \right] \psi(\vec{r} + \vec{R}_i) \\ &= e^{-ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} \hat{h}(\vec{r} + \vec{R}_i) \psi(\vec{r} + \vec{R}_i) = \hat{T}_i^M \hat{h}(\vec{r}) \psi(\vec{r}). \end{aligned} \quad (3.45)$$

Si queremos que  $\hat{T}_x^M$  y  $\hat{T}_y^M$  tengan eigenfunciones en común con  $\hat{h}(\vec{r})$  dichos operadores deben además conmutar entre sí, lo cual impone una condición sobre el flujo en cada celda magnética, como se verá a continuación. Aplicando a definición (3.44) de  $\hat{T}_{x,y}$ , obtenemos

$$\begin{cases} \hat{T}_x^M \hat{T}_y^M \psi(\vec{r}) = e^{-\frac{ie}{\hbar} [\chi_x(\vec{r} + \vec{R}_y) + \chi_y(\vec{r})]} \psi(\vec{r} + \vec{R}_x + \vec{R}_y) \\ \hat{T}_y^M \hat{T}_x^M \psi(\vec{r}) = e^{-\frac{ie}{\hbar} [\chi_x(\vec{r}) + \chi_y(\vec{r} + \vec{R}_x)]} \psi(\vec{r} + \vec{R}_x + \vec{R}_y). \end{cases} \quad (3.46)$$

Para que  $[\hat{T}_x^M, \hat{T}_y^M] = 0$  se debe de satisfacer entonces que

$$\exp \left[ -\frac{ie}{\hbar} \chi_x(\vec{r} + \vec{R}_y) - \frac{ie}{\hbar} \chi_y(\vec{r}) \right] = \exp \left[ -\frac{ie}{\hbar} \chi_x(\vec{r}) - \frac{ie}{\hbar} \chi_y(\vec{r} + \vec{R}_x) \right] \quad (3.47)$$

es decir

$$\exp \left[ -\frac{ie}{\hbar} \left( \chi_x(\vec{r} + \vec{R}_y) - \chi_x(\vec{r}) - \chi_y(\vec{r} + \vec{R}_x) + \chi_y(\vec{r}) \right) \right] = 1. \quad (3.48)$$

Por otro lado, de (3.43) notamos que

$$\int_{\vec{r}}^{\vec{r} + \vec{R}_y} \nabla \chi_x(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' = \int_{\vec{r}}^{\vec{r} + \vec{R}_y} \left( \vec{A}(\vec{r}' + \vec{R}_y) - \vec{A}(\vec{r}') \right) \cdot d\vec{r}', \quad (3.49)$$

entonces

$$\chi_x(\vec{r} + \vec{R}_y) - \chi_x(\vec{r}) = \int_{\vec{r}}^{\vec{r} + \vec{R}_y} \vec{A}(\vec{r}' + \vec{R}_x) \cdot d\vec{r}' - \int_{\vec{r}}^{\vec{r} + \vec{R}_y} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' = \int_{\vec{r} + \vec{R}_x}^{\vec{r} + \vec{R}_x + \vec{R}_y} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \int_{\vec{r} + \vec{R}_y}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}', \quad (3.50)$$

del mismo modo

$$\chi_y(\vec{r} + \vec{R}_x) - \chi_y(\vec{r}) = \int_{\vec{r} + \vec{R}_y}^{\vec{r} + \vec{R}_x + \vec{R}_y} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \int_{\vec{r} + \vec{R}_x}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}'. \quad (3.51)$$

Por lo que el argumento de la función exponencial de (3.48) quedaría como

$$\frac{e}{\hbar} \left[ \int_{\vec{r} + \vec{R}_x}^{\vec{r} + \vec{R}_x + \vec{R}_y} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \int_{\vec{r} + \vec{R}_y}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \int_{\vec{r} + \vec{R}_x + \vec{R}_y}^{\vec{r} + \vec{R}_y} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \int_{\vec{r}}^{\vec{r} + \vec{R}_x} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' \right] = 2\pi l, \quad (3.52)$$

donde el paréntesis cuadrado puede ser reescrito como

$$\begin{aligned} \int_{\vec{r}}^{\vec{r} + \vec{R}_x} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \int_{\vec{r} + \vec{R}_x}^{\vec{r} + \vec{R}_x + \vec{R}_y} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \int_{\vec{r} + \vec{R}_x + \vec{R}_y}^{\vec{r} + \vec{R}_y} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \int_{\vec{r} + \vec{R}_y}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' \\ = \oint_{MUC} \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_{MUC} \vec{B} \cdot d\vec{S} = \Phi, \end{aligned} \quad (3.53)$$

que es el flujo magnético a través de la celda unitaria magnética. Combinando (3.53) con (3.52) y usando  $\Phi_0 = h/e$  el cuanto de flujo magnético, llegamos a que

$$\Phi = l\Phi_0, \quad (3.54)$$

es decir, los operadores de traslación magnéticos conmutan sólo si el flujo en cada celda magnética es una cantidad entera de cuantos de flujo magnético.

Si la propiedad anterior se satisface, podemos escribir los eigenestados de forma análoga a como se hace en el teorema de Bloch usual

$$\hat{T}_i^M \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad i = x, y. \quad (3.55)$$

Si estudiamos además un sistema de tamaño  $M_x \times M_y$  con  $M_x, M_y$  el número de celdas magnéticas en cada dirección, al emplear las condiciones a la frontera cíclica de Born [Kittel, 2007] el conjunto de valores que puede tomar  $k_x, k_y$  quedarían determinados por la primera zona de Brillouin magnética.

$$k_i = \frac{2\pi l_i}{M_i N_i a} \quad l_i = 0, 1, \dots, M_i - 1 \quad i = x, y. \quad (3.56)$$

donde  $N_x \times N_y a^2$  es el tamaño de la celda unitaria magnética que contiene un solo cuanto de flujo magnético.

Ahora aplicamos el resultado anterior para  $\psi(\vec{r}) = u(\vec{r})$  y  $\nu^*(\vec{r})$ , sabiendo que trasladar  $\vec{A}$  es equivalente a aplicar una transformación de norma, y  $u, \nu^*$  transforman de acuerdo a (3.30), es decir

$$\vec{A}(\vec{r}) \rightarrow \vec{A}'(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r}) + \nabla\chi(\vec{r}), \quad \begin{cases} u'(\vec{r}) = u(\vec{r}) \exp\left(\frac{ie}{\hbar}\chi(\vec{r})\right) \\ \nu'(\vec{r}) = \nu(\vec{r}) \exp\left(-\frac{ie}{\hbar}\chi(\vec{r})\right) \end{cases} \quad (3.57)$$

En consecuencia, se propone un nuevo operador de traslación magnético para  $u$  y  $\nu$

$$\hat{T}_i^M \begin{pmatrix} u(\vec{r}) \\ \nu(\vec{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} & 0 \\ 0 & e^{ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(\vec{r} + \vec{R}_i) \\ \nu(\vec{r} + \vec{R}_i) \end{pmatrix}. \quad (3.58)$$

Como ya vimos, trasladar al sistema en cualquiera de sus direcciones periódicas es equivalente a hacer una transformación de norma en  $\vec{A}$ , y como se notó en la sección 3.3, el parámetro de orden adquiere una fase vía (3.27) cuando se efectúa una transformación de norma, entonces, para nuestro sistema periódico, el efecto de aplicar una traslación al parámetro de orden equivale a añadir una fase

$$\Delta(\vec{r} + \vec{R}_i) = \Delta(\vec{r}) \exp\left(\frac{2ie}{\hbar} \chi_i(\vec{r})\right) \quad i = x, y. \quad (3.59)$$

Ahora, verificamos que la transformación (3.58) satisface que  $[\hat{T}_i^M, \hat{\Omega}] = 0$ .

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} \hat{T}_i^M \Psi &= \begin{pmatrix} \hat{h}(\vec{r}) & \Delta(\vec{r}) \\ \Delta^*(\vec{r}) & \hat{h}^*(\vec{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} u(\vec{r} + \vec{R}) \\ e^{ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} \nu(\vec{r} + \vec{R}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} \hat{h}(\vec{r} + \vec{R}) u(\vec{r} + \vec{R}) + e^{-ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} \Delta(\vec{r} + \vec{R}) \nu(\vec{r} + \vec{R}) \\ e^{ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} \Delta^*(\vec{r} + \vec{R}) u(\vec{r} + \vec{R}) + e^{ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} \hat{h}^*(\vec{r} + \vec{R}) \nu(\vec{r} + \vec{R}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} & 0 \\ 0 & e^{ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{h}(\vec{r} + \vec{R}) & \Delta(\vec{r} + \vec{R}) \\ \Delta(\vec{r} + \vec{R}) & \hat{h}^*(\vec{r} + \vec{R}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(\vec{r} + \vec{R}) \\ \nu(\vec{r} + \vec{R}) \end{pmatrix} = \hat{T}_i^M \hat{\Omega} \Psi. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Así, lo anterior nos permite establecer que el operador  $\Omega$  y los operadores de traslación magnéticos  $\hat{T}_{x,y}^M$  pueden diagonalizarse simultáneamente. En consecuencia, los eigenestados de  $\Omega$  son a la vez eigenfunciones de  $\hat{T}_i^M$  con eigenvalores dados por el teorema de Bloch usual, es decir

$$\hat{T}_i^M \begin{pmatrix} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ \nu_{\vec{k}}(\vec{r}) \end{pmatrix} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \begin{pmatrix} u_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ \nu_{\vec{k}}(\vec{r}) \end{pmatrix}, \quad i = x, y. \quad (3.61)$$

Finalmente, combinando (3.58) y (3.61) obtenemos la regla de transformación para las amplitudes  $u_{\vec{k}}$  y  $\nu_{\vec{k}}$

$$\begin{aligned} u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_i) &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} e^{ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} u_{\vec{k}}(\vec{r}), \\ \nu_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_i) &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} e^{-ie\chi_i(\vec{r})/\hbar} \nu_{\vec{k}}(\vec{r}), \end{aligned} \quad (3.62)$$

con  $i = x, y$ .

Por ejemplo, para el potencial vectorial en la norma de Coulomb dado por (3.36), tenemos que

$$\nabla \chi_x = \vec{A}(x + N_x a, y) - \vec{A}(x, y) = B_0 N_x a \hat{e}_y \quad (3.63)$$

por lo que

$$\chi_x(x, y) = B_0 N_x a y \quad (3.64)$$

del mismo modo

$$\nabla \chi_y = \vec{A}(x, y + N_y a) - \vec{A}(x, y) = 0 \quad (3.65)$$

por lo que  $\chi_y = 0$ . Sustituyendo esto en (3.62)

$$\begin{cases} u_{\vec{k}}(x + N_x a, y) = e^{ik_x N_x a} e^{ieB_0 N_x a y/\hbar} u_{\vec{k}}(x, y) \\ \nu_{\vec{k}}(x + N_x a, y) = e^{ik_x N_x a} e^{-ieB_0 N_x a y/\hbar} \nu_{\vec{k}}(x, y) \\ u_{\vec{k}}(x, y + N_y a) = e^{ik_y N_y a} u_{\vec{k}}(x, y) \\ \nu_{\vec{k}}(x, y + N_y a) = e^{ik_y N_y a} \nu_{\vec{k}}(x, y) \end{cases}. \quad (3.66)$$

### 3.4. El modelo de Hubbard

En los materiales de banda estrecha es conveniente representar a los operadores de campo en términos de orbitales locales. Un ejemplo de dichos orbitales sería el conjunto completo de eigenfunciones de Wannier que se emplea en redes atómicas en la aproximación de amarre fuerte para sistemas de distancias interatómicas largas [Zhu, 2016]. Si consideramos que sólo una banda estrecha está parcialmente llena en un sólido, los operadores de campo pueden ser expresados en término de los operadores de creación de orbitales de Wannier,

$$\hat{\Psi}_\sigma(\vec{r}) = \sum_i W_{\vec{R}_i}(\vec{r})\hat{c}_{i,\sigma}, \quad \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\vec{r}) = \sum_i W_{\vec{R}_i}^*(\vec{r})\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger, \quad (3.67)$$

donde  $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$  crea un electrón con espín  $\sigma$  en el estado  $W_{\vec{R}_i}(\vec{r})$  con  $\vec{R}_i$  la  $i$ -ésima posición atómica.

Sustituyendo estas expresiones en (3.1), obtenemos el hamiltoniano en la representación de Wannier:

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{ijkl}\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger\hat{c}_{l,\sigma'}\hat{c}_{k,\sigma} \quad (3.68)$$

con

$$t_{ij} = \int d^3\vec{r} W_{\vec{R}_i}(\vec{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 - e\phi(r) \right] W_{\vec{R}_j}(\vec{r}), \quad (3.69)$$

y

$$V_{ijkl} = \int \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' V(\vec{r} - \vec{r}') W_{\vec{R}_i}^*(\vec{r}) W_{\vec{R}_j}^*(\vec{r}') W_{\vec{R}_k}(\vec{r}) W_{\vec{R}_l}(\vec{r}'). \quad (3.70)$$

Cabe recalcar que de nuevo hemos empleado un hamiltoniano que no depende del espín. El término (3.69) se conoce como la integral de salto. En los sistemas de amarre fuerte, los orbitales de Wannier están altamente localizados alrededor de las posiciones atómicas, por lo que las integrales (3.69) y (3.70) decrecen rápidamente entre orbitales centrados en posiciones atómicas cada vez más separadas [Hubbard, 1963].

En el modelo de Hubbard atractivo se consideran sólo las contribuciones entre electrones del mismo sitio en la integral (3.70). El caso que considera la atracción entre primeros vecinos se conoce como el modelo de Hubbard extendido.

Primero reescribimos el operador de una sola partícula en el modelo de Hubbard considerando la medición de la energía respecto al potencial químico,

$$\hat{H}'_0 = \hat{H}_0 - \mu\hat{N} = \sum_{i,\sigma} (t_{ii} - \mu)\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger\hat{c}_{i,\sigma} + \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij}\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,\sigma} + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t_{ij}\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,\sigma}, \quad (3.71)$$

donde  $\langle i, j \rangle$  y  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  denota que  $i$  y  $j$  son primeros y segundos vecinos respectivamente. Del mismo modo, el potencial de interacción para electrones en el mismo sitio dentro del modelo de una sola banda está dado por

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{i,\sigma} V_{iiii}\hat{c}_{i\sigma}^\dagger\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}\hat{c}_{i\sigma} = \sum_i V_{iiii}\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger c_{i,\downarrow}\hat{c}_{i,\uparrow}. \quad (3.72)$$

En ausencia de campo magnético, el hamiltoniano de una sola partícula tiene la periodicidad de la red atómica, por lo que las integrales de salto no dependen de los sitios entre los que se evalúan sino sólo de la distancia entre ellos, lo cual nos permite escribir  $t_{ii} = \varepsilon$  y  $t_{ij} = t$ . Por otro lado,

como asumimos que el potencial de emparejamiento  $V$  es atractivo y local, entonces  $V_{iiii} = -V$ , de esta forma obtenemos el hamiltoniano de Hubbard para electrones superconductores,

$$\hat{H} = (\epsilon - \mu) \sum_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} + t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - V \sum_i \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow}. \quad (3.73)$$

donde  $V > 0$  para lograr una interacción atractiva entre electrones en el mismo sitio.

### 3.5. Substitución de Peierls en el modelo de Hubbard

Ya vimos que la presencia de un campo magnético homogéneo rompe la simetría traslacional discreta del hamiltoniano, por lo que ya no se cumple que las integrales de salto  $t_{ij}$  dependen solamente de la distancia entre los sitios  $i, j$ .

Para tomar en cuenta el efecto del campo magnético en el modelo de Hubbard, R.E. Peierls empleó una expansión en los operadores de campo añadiendo una fase extra a las funciones de Wannier [Peierls, 1933]

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_i W(\vec{r} - \vec{R}_i) e^{ie\Lambda_i(\vec{r})/\hbar} \hat{c}_{i\sigma}, \quad (3.74)$$

donde

$$\Lambda_i(\vec{r}) = \int_{\vec{R}_i}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' = \int_0^1 (\vec{r} - \vec{R}_i) \cdot \vec{A}(\vec{R}_i + \lambda(\vec{r} - \vec{R}_i)) d\lambda \quad (3.75)$$

es la integral de línea de  $\vec{A}(\vec{r})$  en una recta desde  $\vec{R}_i$  hasta  $\vec{r}$ . Nótese que  $\vec{r}'(\lambda) = \vec{R}_i + \lambda(\vec{r} - \vec{R}_i)$ .

El efecto del factor exponencial en (3.74) es el de remover de forma aproximada el término  $\vec{A}$  que se añade al operador de momento para introducir el campo magnético al hamiltoniano. Así, al emplear el resultado (3.29), notamos que

$$\left( \nabla - \frac{ie}{\hbar} \vec{A} \right)^2 e^{ie\Lambda/\hbar} W(\vec{r} - \vec{R}_i) = e^{ie\Lambda/\hbar} \left( \nabla - \frac{ie}{\hbar} (\vec{A} - \nabla\Lambda_i) \right)^2 W(\vec{r} - \vec{R}_i). \quad (3.76)$$

Para calcular  $\nabla\Lambda_i$  usamos la identidad vectorial  $\nabla(\vec{u} \cdot \vec{v}) = \vec{u} \times \nabla \times \vec{v} + \vec{v} \times \nabla \times \vec{u} + (\vec{u} \cdot \nabla)\vec{v} + (\vec{v} \cdot \nabla)\vec{u}$ , que al introducirse en la definición de  $\Lambda_i$  resulta en

$$\begin{aligned} \nabla\Lambda_i = & \int_0^1 \left( (\vec{r} - \vec{R}_i) \times \underbrace{(\nabla \times \vec{A}(\vec{r}'))}_{=\lambda\vec{B}(\vec{r}')} + \vec{A}(\vec{r}') \times \underbrace{\nabla \times (\vec{r} - \vec{R}_i)}_{=0} + (\vec{r} - \vec{R}_i) \cdot \nabla \vec{A}(\vec{r}') \right. \\ & \left. + \underbrace{\vec{A}(\vec{r}') \cdot \nabla (\vec{r} - \vec{R}_i)}_{=\vec{A}(\vec{r}')} \right) d\lambda, \end{aligned} \quad (3.77)$$

donde se utilizó la identidad  $\nabla = \lambda \nabla'$  por la regla de cadena, entonces

$$\nabla\Lambda_i = \int_0^1 \vec{A}(\vec{r}') d\lambda + \int_0^1 (\vec{r} - \vec{R}_i) \cdot \nabla \vec{A}(\vec{r}') d\lambda + \int_0^1 (\vec{r} - \vec{R}_i) \times \lambda \vec{B}(\vec{r}') d\lambda. \quad (3.78)$$

Al usar integración por partes en la primera integral de (3.77) obtenemos

$$\int_0^1 \vec{A}(\vec{r}') d\lambda = \lambda \vec{A}(\vec{r}') \Big|_0^1 - \int_0^1 \lambda \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}')}{\partial \lambda} d\lambda, \quad (3.79)$$

pero

$$\frac{\partial A_j(\vec{r}')}{\partial \lambda} = \frac{\partial A_j(\vec{r}')}{\partial \vec{r}'} \cdot \frac{\partial \vec{r}'}{\partial \lambda} = (\vec{r} - \vec{R}_i) \cdot \nabla' A_j(\vec{r}'), \quad (3.80)$$

por lo que

$$\frac{\partial \vec{A}}{\partial \lambda} = (\vec{r} - \vec{R}_i) \cdot \nabla' \vec{A}(\vec{r}'). \quad (3.81)$$

Sustituyendo (3.79) y(3.81) en (3.77) obtenemos

$$\nabla \Lambda_i = \vec{A}(\vec{r}) + (\vec{r} - \vec{R}_i) \times \int_0^1 \lambda \vec{B}(\vec{r} + \lambda(\vec{R}_i - \vec{r})) d\lambda, \quad (3.82)$$

que al reinsertar en la integral (3.69) resulta en la modificación para el término de salto de (3.73) a

$$\sum_{i,j,\sigma} \tilde{t}_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}, \quad (3.83)$$

donde

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{ij} = & \int W(\vec{r} - \vec{R}_i) e^{ie(\Lambda_i - \Lambda_j)/\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla + \frac{ie}{\hbar} (\vec{r} - \vec{R}_j) \right. \right. \\ & \left. \left. \times \int_0^1 \lambda \vec{B}(\vec{R}_j + \lambda(\vec{r} - \vec{R}_j)) d\lambda \right)^2 - e\phi(\vec{r}) \right] W(\vec{r} - \vec{R}_j) d^3\vec{r}. \end{aligned} \quad (3.84)$$

Invocando el hecho de que los orbitales de Wannier son altamente localizados, la integral del término extra del hamiltoniano sólo es significativa para los valores de  $\vec{r} \approx \vec{R}_j$  [Zhu, 2016], y asumiendo que el campo magnético no varía muy rápidamente entre distintos puntos de la red de átomos (en nuestro caso es constante) podemos despreciar el segundo término dentro del paréntesis redondo (3.84), obteniendo

$$\tilde{t}_{ij} \approx \int W(\vec{r} - \vec{R}_i) e^{ie(\Lambda_i - \Lambda_j)/\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - e\phi(\vec{r}) \right) W(\vec{r} - \vec{R}_j) d^3\vec{r}. \quad (3.85)$$

Por otro lado, dado que  $e/\hbar = 2\pi/\Phi_0$ , notamos que la fase en (3.85) puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{\Phi_0} (\Lambda_i - \Lambda_j) &= \frac{2\pi}{\Phi_0} \left[ \int_{\vec{R}_i}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \int_{\vec{r}}^{\vec{R}_j} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' \right] \\ &= \frac{2\pi}{\Phi_0} \left[ - \int_{\vec{R}_i}^{\vec{R}_j} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' + \oint_{\vec{R}_i \rightarrow \vec{r} \rightarrow \vec{R}_j \rightarrow \vec{R}_i} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' \right] \end{aligned} \quad (3.86)$$

Nótese que la última integral de (3.86) es la integral de flujo magnético que pasa por el triángulo con vértices en  $\vec{r}$ ,  $\vec{R}_i$  y  $\vec{R}_j$ .

Al sustituir (3.86) en (3.85) y emplear que los términos dentro de la integral sólo son significativos para  $\vec{r} \approx \vec{R}_i$ , notamos que las dimensiones del triangulo mencionado anteriormente son pequeñas comparadas con las dimensiones de la celda unitaria magnética, ya que se considera que  $i$  y  $j$  son a lo más segundos vecinos, por lo que el flujo magnético a través de dicho triángulo es pequeño comparado con  $\Phi_0$ , lo cual nos permite despreciar su contribución en (3.85). Habiendo hecho las aproximaciones previas, se obtiene

$$\tilde{t}_{ij} \approx t_{ij} e^{i\phi_{ij}} \quad (3.87)$$

donde

$$t_{lj} = \int W^*(\vec{r} - \vec{R}_l) \left( \frac{\vec{p}^2}{2m} - eV(\vec{r}) \right) W(\vec{r} - \vec{R}_j) d^3\vec{r} \quad (3.88)$$

es la integral de salto en la ausencia de campo magnético y

$$\phi_{lj} = -\frac{e}{\hbar} \int_{\vec{R}_l}^{\vec{R}_j} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' = -\frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{\vec{R}_l}^{\vec{R}_j} \vec{A}(\vec{r}') \cdot d\vec{r}' \quad (3.89)$$

se conoce como la fase de Peierls.

En conclusión, el hamiltoniano de Hubbard en presencia de un campo magnético que varía lentamente en el espacio es

$$\hat{H} = (\epsilon - \mu) \sum_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} + t \sum_{\langle l,j \rangle} e^{i\phi_{lj}} \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + t' \sum_{\langle\langle l,j \rangle\rangle} e^{i\phi_{lj}} \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - V \sum_i \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow}, \quad (3.90)$$

donde  $\langle \dots \rangle$  indica primeros vecinos y  $\langle\langle \dots \rangle\rangle$  indica segundos vecinos.

### 3.6. Ecuaciones BdG en el modelo de Hubbard

Aplicando la aproximación de campo medio de pares a (3.90), se tiene

$$\begin{aligned} \hat{H}_{MF} &= (\epsilon - \mu) \sum_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} + t \sum_{\langle l,j \rangle, \sigma} e^{i\phi_{lj}} \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + t' \sum_{\langle\langle l,j \rangle\rangle, \sigma} e^{i\phi_{lj}} \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \\ &\quad - V \sum_i \left( \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \rangle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} + \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle - \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle \right) \\ &= (\epsilon - \mu) \sum_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} + \sum_{\langle l,j \rangle, \sigma} \tilde{t}_{lj} \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \sum_{\langle\langle l,j \rangle\rangle, \sigma} \tilde{t}'_{lj} \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \\ &\quad + \sum_i \left( \Delta_i^* \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} + \Delta_i \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger - \frac{|\Delta_i|^2}{V} \right) \\ &= \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 + \hat{H}_4, \end{aligned} \quad (3.91)$$

donde

$$\tilde{t}_{lj} = t e^{i\phi_{lj}}, \quad \tilde{t}'_{lj} = t' e^{i\phi_{lj}} \quad \text{y} \quad \Delta_i \equiv -V \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle. \quad (3.92)$$

Usando el mismo enfoque de la sección (3.1), se hace una transformación de Bogoliuvov sobre los operadores  $\hat{c}_{i,\sigma}$   $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$ ,

$$\hat{c}_{i,\uparrow} = \sum_{\alpha} \left( u_i^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} - v_i^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \right) \quad \hat{c}_{i,\downarrow} = \sum_{\alpha} \left( u_i^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} + v_i^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \right), \quad (3.93)$$

de tal forma que dicha transformación diagonalize el hamiltoniano (3.91),

$$\hat{H}_{MF} = E_0 + \sum_{\alpha,\sigma} E_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}. \quad (3.94)$$

De nuevo, demandamos que los operadores de cuasipartículas obedezcan la estadística de Fermi

$$\left\{ \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger, \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma'} \right\} = \delta_{\alpha,\alpha'} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (3.95)$$

y

$$\left\{ \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger, \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma'}^\dagger \right\} = \left\{ \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}, \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma'} \right\} = 0. \quad (3.96)$$

Lo anterior a su vez implica que

$$\left[ \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}, \hat{H}_{MF} \right] = E_\alpha \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \quad \left[ \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger, \hat{H}_{MF} \right] = -E_\alpha \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger, \quad (3.97)$$

o bien

$$\left[ \hat{c}_{n\uparrow}, \hat{H}_{MF} \right] = \sum_\alpha \left[ u_n^\alpha \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} - \nu_n^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger, \hat{H}_{MF} \right] = \sum_\alpha E_\alpha \left( u_n^\alpha \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} + \nu_n^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger \right). \quad (3.98)$$

Por otro lado

$$\left[ \hat{c}_{i,\uparrow}, \hat{H}_{MF} \right] = \left[ \hat{c}_{i,\uparrow}, \hat{H}_1 \right] + \left[ \hat{c}_{i,\uparrow}, \hat{H}_2 \right] + \left[ \hat{c}_{i,\uparrow}, \hat{H}_3 \right]. \quad (3.99)$$

Al desarrollar cada conmutador de (3.99), obtenemos

$$\begin{aligned} \left[ \hat{c}_{n,\uparrow}, \hat{H}_1 \right] &= \sum_{i,\sigma} (\varepsilon - \mu) \left[ \hat{c}_{n\uparrow}, \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \right] \\ &= \sum_{i,\sigma} (\varepsilon - \mu) \left( \underbrace{\left\{ \hat{c}_{n,\uparrow}, \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \right\}}_{=\delta_{i,j} \delta_{\uparrow,\sigma}} \hat{c}_{i,\sigma} - \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \underbrace{\left\{ \hat{c}_{n,\uparrow}, \hat{c}_{i,\sigma} \right\}}_{=0} \right) = (\varepsilon - \mu) \hat{c}_{n,\uparrow}, \end{aligned} \quad (3.100)$$

$$\begin{aligned} \left[ \hat{c}_{n,\uparrow}, \hat{H}_2 \right] &= \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \tilde{t}_{ij} \left[ \hat{c}_{n,\uparrow}, \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] \\ &= \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \tilde{t}_{ij} \left( \underbrace{\left\{ \hat{c}_{n,\uparrow}, \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \right\}}_{\delta_{n,i} \delta_{\uparrow,\sigma}} \hat{c}_{j,\sigma} - \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \underbrace{\left\{ \hat{c}_{n,\uparrow}, \hat{c}_{j,\sigma} \right\}}_{=0} \right) = \sum_{\langle n,j \rangle, \sigma} \tilde{t}_{nj} \hat{c}_{j,\uparrow}, \end{aligned} \quad (3.101)$$

$$\begin{aligned} \left[ \hat{c}_{n,\uparrow}, \hat{H}_3 \right] &= \sum_{\langle\langle l,j \rangle\rangle, \sigma} \tilde{t}'_{l,j} \left[ \hat{c}_{n,\uparrow}, \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] \\ &= \sum_{\langle\langle l,j \rangle\rangle, \sigma} \tilde{t}'_{l,j} \left( \underbrace{\left\{ \hat{c}_{n,\uparrow}, \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \right\}}_{\delta_{n,l} \delta_{\uparrow,\sigma}} \hat{c}_{j,\sigma} - \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \underbrace{\left\{ \hat{c}_{n,\uparrow}, \hat{c}_{j,\sigma} \right\}}_{=0} \right) = \sum_{\langle\langle n,j \rangle\rangle, \sigma} \tilde{t}'_{nj} \hat{c}_{j,\uparrow}, \end{aligned} \quad (3.102)$$

y

$$\begin{aligned} \left[ \hat{c}_{n\uparrow}, \hat{H}_4 \right] &= \sum_i \Delta_i \left[ \hat{c}_{n\uparrow}, \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \right] \\ &= \sum_i \Delta_i \left( \underbrace{\left\{ \hat{c}_{n\uparrow}, \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \right\}}_{=\delta_{ni}} \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \underbrace{\left\{ \hat{c}_{n\uparrow}, \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \right\}}_{=0} \right) = \Delta_n \hat{c}_{n\downarrow}^\dagger, \end{aligned} \quad (3.103)$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} \left[ \hat{c}_{n\uparrow}, \hat{H}_{MF} \right] &= \sum_\alpha (\varepsilon - \mu) \left( u_n^\alpha \hat{\gamma}_{\alpha\uparrow} - \nu_n^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha\downarrow}^\dagger \right) + \sum_\alpha \sum_{\langle n,j \rangle} \tilde{t}_{nj} \left( u_j^\alpha \hat{\gamma}_{\alpha\uparrow} - \nu_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha\downarrow}^\dagger \right) \\ &\quad + \sum_\alpha \sum_{\langle\langle n,j \rangle\rangle} \tilde{t}'_{nj} \left( u_j^\alpha \hat{\gamma}_{\alpha\uparrow} - \nu_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha\downarrow}^\dagger \right) + \sum_\alpha \Delta_n \left( u_n^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha\downarrow}^\dagger + \nu_n^\alpha \hat{\gamma}_{\alpha\uparrow} \right) \\ &= \sum_\alpha \left( (\varepsilon - \mu) u_n^\alpha + \sum_{\langle n,j \rangle} \tilde{t}_{nj} u_j^\alpha + \sum_{\langle\langle n,j \rangle\rangle} \tilde{t}'_{nj} u_j^\alpha + \Delta_n \nu_n^\alpha \right) \hat{\gamma}_{\alpha\uparrow} \\ &\quad - \sum_\alpha \left( (\varepsilon - \mu) \nu_n^{\alpha*} + \sum_{\langle n,j \rangle} \tilde{t}_{nj} \nu_j^{\alpha*} + \sum_{\langle\langle n,j \rangle\rangle} \tilde{t}'_{nj} \nu_j^{\alpha*} - \Delta_n u_n^{\alpha*} \right) \hat{\gamma}_{\alpha\downarrow}^\dagger. \end{aligned} \quad (3.104)$$

Al igualar (3.104) con (3.99) y usar que los operadores  $\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger(\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma})$  crean estados linealmente independientes, lo anterior sólo se cumple si

$$(\epsilon - \mu)u_n^\alpha + \sum_{\langle n,j \rangle} \tilde{t}_{nj}u_j^\alpha + \sum_{\langle\langle n,j \rangle\rangle} \tilde{t}'_{nj}u_j^\alpha + \Delta_n\nu_n^\alpha = E_\alpha u_n^\alpha, \quad (3.105)$$

y

$$\Delta_n^* u_n^\alpha - (\epsilon - \mu)\nu_n^\alpha - \sum_{\langle n,j \rangle} \tilde{t}_{nj}^* \nu_j^\alpha - \sum_{\langle\langle n,j \rangle\rangle} \tilde{t}'_{nj}^* \nu_j^\alpha = E_\alpha \nu_n^\alpha, \quad (3.106)$$

las cuales son las ecuaciones de BdG en el modelo de Hubbard.

Las ecuaciones (3.105) y (3.106) se pueden reescribir en forma matricial como

$$\Omega \begin{pmatrix} u^\alpha \\ \nu^\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{H} & \Delta \\ \Delta^* & -\mathbf{H}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^\alpha \\ \nu^\alpha \end{pmatrix} = E_\alpha \begin{pmatrix} u^\alpha \\ \nu^\alpha \end{pmatrix}, \quad (3.107)$$

donde

$$\Delta_{ij} = \Delta_i \delta_{ij}, \quad H_{ij} = \begin{cases} \epsilon - \mu & \text{si } i = j \\ \tilde{t}_{ij} & \text{si } i, j \text{ son primeros vecinos} \\ \tilde{t}'_{ij} & \text{si } i, j \text{ son segundos vecinos} \end{cases} \quad (3.108)$$

mientras que

$$u^\alpha = \begin{pmatrix} u_1^\alpha \\ \vdots \\ u_N^\alpha \end{pmatrix} \quad \nu^\alpha = \begin{pmatrix} \nu_1^\alpha \\ \vdots \\ \nu_N^\alpha \end{pmatrix} \quad (3.109)$$

donde  $N$  es el número total de átomos del sistema. Además, el parámetro de orden está dado por (Apéndice A)

$$\Delta_i = \frac{V}{2} \sum_{\alpha} u_i^\alpha \nu_i^{\alpha*} \tanh \left( \frac{E_\alpha}{2k_B T} \right) \quad (3.110)$$

Las soluciones  $u^\alpha, \nu^\alpha$  y  $E_\alpha$  de la ecuación de eigenvalores (3.107) se insertan en (3.110) para obtener un nuevo parámetro de orden  $\Delta_i$  que se usará de nuevo en (3.107) hasta lograr autoconsistencia. Sin embargo, para un sistema de  $N$  átomos, el tamaño de la matriz BdG es de  $2N \times 2N$ , mientras que los procesos estándar de diagonalización operan con un tiempo de cómputo que crece como  $n^3$  con  $n$  el número de renglones de la matriz [Han, 2010]. Por lo que se hace uso del teorema de Bloch magnético para estudiar el sistema en una celda unitaria magnética con condiciones de cuasiperiodicidad a la frontera (3.66)

$$\begin{cases} u_{\vec{R}_i + \vec{R}_x}(\vec{k}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_x} e^{ie\vec{A}(\vec{R}_x) \cdot \vec{R}_i / \hbar} u_{\vec{R}_i}(\vec{k}) \\ \nu_{\vec{R}_i + \vec{R}_x}(\vec{k}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_x} e^{-ie\vec{A}(\vec{R}_x) \cdot \vec{R}_i / \hbar} \nu_{\vec{R}_i}(\vec{k}) \\ u_{\vec{R}_i + \vec{R}_y}(\vec{k}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_y} u_{\vec{R}_i}(\vec{k}) \\ \nu_{\vec{R}_i + \vec{R}_y}(\vec{k}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_y} \nu_{\vec{R}_i}(\vec{k}), \end{cases} \quad (3.111)$$

donde  $\vec{R}_{x,y} = N_{x,y} a \hat{e}_{x,y}$  son los vectores de la celda unitaria magnética y los valores que puede tomar  $\vec{k}$  están dados por (3.56).

Se puede además obtener la distribución de corriente empleando la variación temporal del valor esperado de la densidad de partículas  $\hat{n}_i = \hat{n}_{i,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow}$  usando la ecuación de evolución de Heisenberg,

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{n}_i \rangle}{dt} = \left\langle \left[ \hat{n}_i, \hat{H}_{MF} \right] \right\rangle, \quad (3.112)$$

de nuevo calculamos cada término por separado. Primero notamos que

$$\left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{n}_{j,\sigma'} \right] = \left[ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma'} \right] = \left\{ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \right\} \hat{c}_{j,\sigma'} - \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \left\{ \hat{c}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'} \right\} = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\sigma'} \hat{c}_{j,\sigma'}. \quad (3.113)$$

y al tomar el operador adjunto de (3.113), se tiene

$$\left[ \hat{n}_{j,\sigma'}, \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \right] = \delta_{i,j} \delta_{\sigma,\sigma'} \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger. \quad (3.114)$$

Así

$$\left[ \hat{n}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma'} \right] = \left[ \hat{n}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \right] \hat{c}_{l,\sigma'} + \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \left[ \hat{n}_{i,\sigma}, \hat{c}_{l,\sigma'} \right] = (\delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} - \delta_{il} \delta_{\sigma,\sigma'}) \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma'}. \quad (3.115)$$

Con esto notamos que

$$\begin{aligned} \left[ \hat{n}_{i,\sigma}, \hat{H}_1 \right] &= \sum_{j,\sigma'} (\varepsilon - \mu) \left[ \hat{n}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma'} \right] = \sum_{j,\sigma'} (\varepsilon - \mu) (\delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} - \delta_{ij} \delta_{\sigma,\sigma'}) \hat{c}_{j,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma'} = 0, \\ \left[ \hat{n}_{i,\sigma}, \hat{H}_2 \right] &= \sum_{\langle j,l \rangle, \sigma'} t'_{jl} (\delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} - \delta_{il} \delta_{\sigma,\sigma'}) \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma'} = \sum_{\langle j,i \rangle} \left( t'_{ji} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} - t'_{ij} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right) \\ \left[ \hat{n}_i, \hat{H}_3 \right] &= \sum_j \left( \Delta_j \left[ \hat{n}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \right] + \Delta_j^* \left[ \hat{n}_{i,\sigma}, \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow} \right] \right) \\ &= \sum_j \left( \Delta_j (\delta_{ij} \delta_{\sigma\uparrow} + \delta_{ij} \delta_{\sigma\downarrow}) \hat{c}_{j\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger - \Delta_j^* (\delta_{ij} \delta_{\sigma\downarrow} + \delta_{ij} \delta_{\sigma\uparrow}) \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{j\uparrow} \right) \\ &= \Delta_i (\delta_{\sigma\uparrow} + \delta_{\sigma\downarrow}) \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger - \Delta_i^* (\delta_{\sigma\downarrow} + \delta_{\sigma\uparrow}) \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow} \end{aligned} \quad (3.116)$$

por lo que

$$\left\langle \left[ \hat{n}_i, \hat{H}_{MF} \right] \right\rangle = \sum_{\langle j,i \rangle, \sigma} \left( t'_{ji} \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \rangle - t'_{ij} \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \right) + 2\Delta_i \langle \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \rangle - 2\Delta_i^* \langle \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow} \rangle. \quad (3.117)$$

Nótese que los dos últimos términos se cancelan. Usando la ecuación de continuidad, asociamos tales variaciones de densidad de partículas a la corriente local del  $l$ -ésimo sitio en las direcciones  $x$  y  $y$  de tal forma que [Zhu, 2016]

$$J_{l,x} = \frac{e}{i\hbar} \sum_{j=l\pm\mathbf{e}_x,\sigma} \left( t'_{lj} \langle \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle - t'_{jl} \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma} \rangle \right) \quad (3.118)$$

y

$$J_{l,y} = \frac{e}{i\hbar} \sum_{j=l\pm\mathbf{e}_y,\sigma} \left( t'_{lj} \langle \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle - t'_{jl} \langle \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma} \rangle \right). \quad (3.119)$$

### 3.7. Implementación numérica

En el presente trabajo se estudian las soluciones a las ecuaciones BdG en dos tipos de sistemas; nanoestructuras finitas y redes cuadradas. Para las nanoestructuras cuadradas se emplean condiciones fijas a la frontera,

$$\begin{cases} u_{i,N_y+1}^\alpha = u_{i,0}^\alpha = u_{0,j}^\alpha = u_{N_x+1,j}^\alpha = 0 \\ \nu_{i,N_y+1}^\alpha = \nu_{i,0}^\alpha = \nu_{0,j}^\alpha = \nu_{N_x+1,j}^\alpha = 0 \end{cases}, \quad (3.120)$$

donde  $N_x = N_y$  son las dimensiones del sistema. Por otro lado, para el caso de redes cuadradas, se emplearon las condiciones de frontera (3.111), limitándonos al potencial magnético

$$\vec{A} = B_0(0, x, 0), \quad (3.121)$$

el cual satisface que  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$  (norma de Coulumb) y  $\nabla \times \vec{A} = B_0 \hat{e}_z$ .

En el caso de una red infinita, el objetivo es investigar el estado superconductor suponiendo el flujo por cada celda unitaria magnética es el mínimo posible, i.e.  $\Phi_0$ , por lo que si las dimensiones de la celda unitaria magnética son  $N_x a \times N_y a$ , entonces

$$B_0 = \frac{\Phi_0}{N_x N_y a^2}. \quad (3.122)$$

Así, la integral de salto (3.87) quedaría como

$$\tilde{t}_{l,j} = \begin{cases} -t & \text{si } \vec{R}_l = (m_x, m_y)a, \quad R_j = (m_x \pm 1, m_y)a \\ -t \exp\left(\pm \frac{2\pi i m_y}{N_x N_y}\right) & \text{si } \vec{R}_l = (m_x, m_y)a, \quad \vec{R}_j = (m_x, m_y \pm 1)a, \end{cases} \quad (3.123)$$

mientras que las condiciones de cuasiperiodicidad (3.111) quedarían explícitamente como

$$\begin{cases} u_{m_x \pm N_x, m_y}(\vec{k}) = e^{\pm i k_x N_x a} u_{m_x, m_y}(\vec{k}) \\ u_{m_x, m_y \pm N_y}(\vec{k}) = e^{\pm i k_y N_y a} e^{\pm i 2\pi m_x / N_x} u_{m_x, m_y}(\vec{k}) \\ \nu_{m_x \pm N_x, m_y}(\vec{k}) = e^{\pm i k_x N_x a} \nu_{m_x, m_y}(\vec{k}) \\ \nu_{m_x, m_y \pm N_y}(\vec{k}) = e^{\pm i k_y N_y a} e^{\mp i 2\pi m_x / N_x} \nu_{m_x, m_y}(\vec{k}) \end{cases}. \quad (3.124)$$

Graficamente, lo anterior se muestra en la Figura 3.2

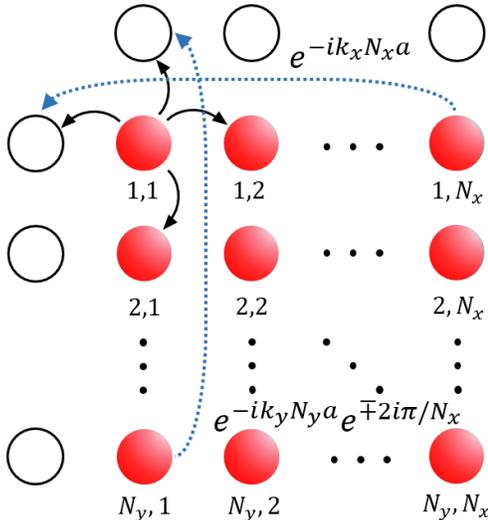


Figura 3.2: Celda unitaria magnética de  $N_x \times N_y$  átomos. Las flechas negras indican los primeros vecinos del sitio considerado, mientras que las flechas punteadas indican la diferencia de fase de las amplitudes  $u$  y  $\nu$  entre sitios equivalentes dentro y fuera de la celda unitaria magnética.

### 3.8. Vórtices magnéticos en nanoestructuras bidimensionales

En esta sección se analiza la superconductividad en nanoestructuras cuadradas, en las cuales se usaron las condiciones a la frontera fijas (3.119). Primero se estudian las diferencias en la brecha

superconductor para dos elecciones distintas del potencial magnético; asimétrico  $\vec{A}_1$  y simétrico  $\vec{A}_2$ , donde

$$\vec{A}_1 = B_0(0, x, 0) \quad \text{y} \quad \vec{A}_2 = \frac{B_0}{2}(-y, x, 0). \quad (3.125)$$

Nótese que tanto  $\vec{A}_1$  como  $\vec{A}_2$  satisfacen que  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$  y  $\nabla \times \vec{A} = B_0 \hat{e}_z$ . Para tales fines, se resuelven numéricamente las ecuaciones BdG en un sistema de  $29 \times 29$  sitios.

Como se observa en la Figura 3.3, las ecuaciones BdG dan lugar al surgimiento de un punto donde se anula la brecha superconductor, y como se mostrará más adelante, éste representa el centro del vórtice magnético. Nótese que ambas elecciones del potencial  $\vec{A}$  convergen a la misma solución de forma distinta, sin embargo, el tiempo de convergencia es más largo para la elección de  $\vec{A}_2$ .

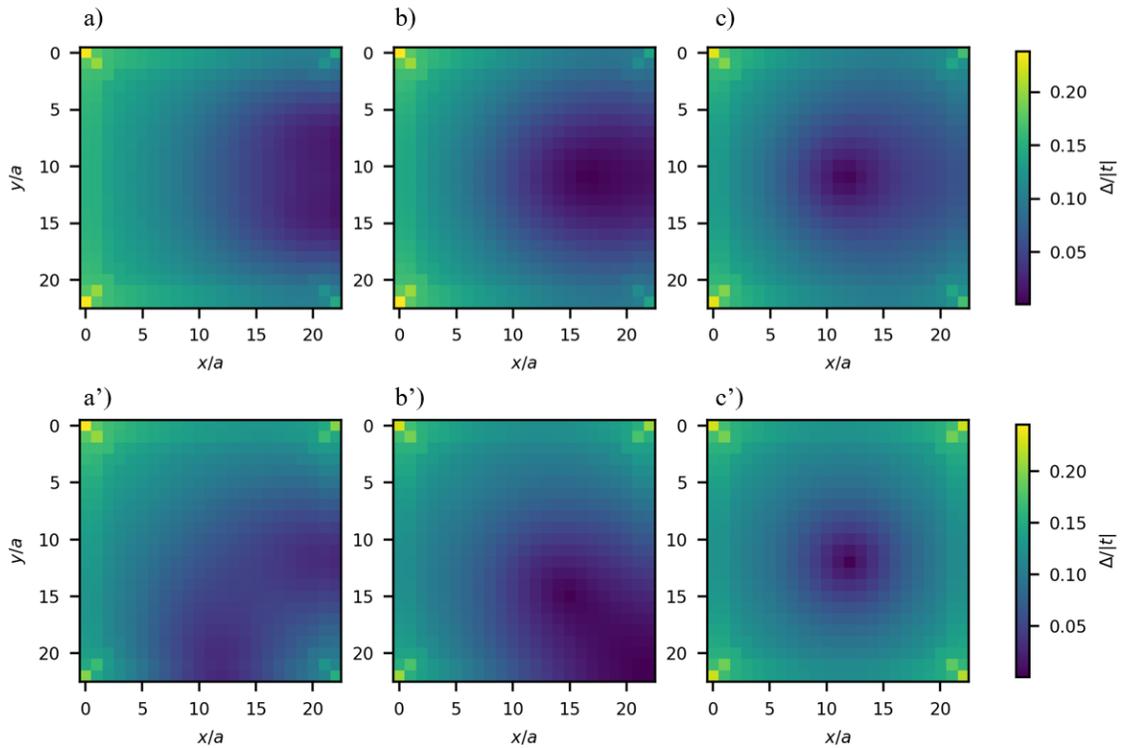


Figura 3.3: Evolución de la brecha superconductor ( $|\Delta_i|/|t|$ ) en una nanoestructura cuadrada de  $29 \times 29$  sitios para  $V = |t|$ ,  $t' = -0.15|t|$ ,  $k_B T = 0.1|t|$  y  $B = \Phi_0/(N_x a)^2$ . En la parte superior se muestra  $|\Delta|/|t|$  usando la norma asimétrica  $\vec{A}_1$  después de (a)  $n = 10$ , (b)  $n = 20$  y (c)  $n = 50$  iteraciones respectivamente, mientras que en la parte inferior se muestra  $|\Delta|/|t|$  empleando la norma simétrica  $\vec{A}_2$  después de (a')  $n = 10$ , (b')  $n = 150$  y (c')  $n = 300$  iteraciones.

En la figura 3.4 se muestra la convergencia de (a) las brechas superconductoras ( $\Delta_i$ ) y (b) la energía libre de Helmholtz ( $F$ ) empleando la norma asimétrica (símbolos rojos) y simétrica (símbolos azules) como función del número de iteraciones. La energía libre se calculó mediante la siguiente fórmula

$$F = \sum_{\alpha} \left[ E_{\alpha} - 2k_B T \ln \left( 2 \cosh \frac{E_{\alpha}}{2k_B T} \right) \right]. \quad (3.126)$$

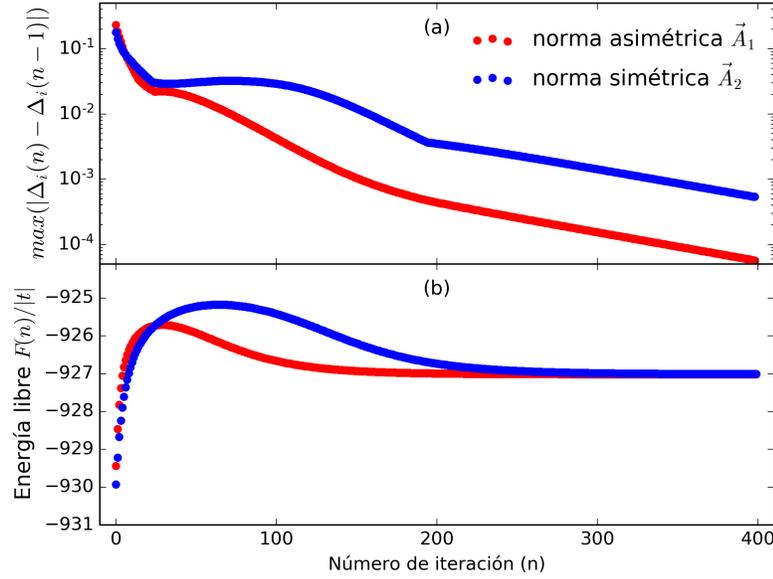


Figura 3.4: Convergencia de (a) las brechas superconductoras  $\Delta_i$  y (b) la energía libre de Helmholtz ( $F$ ) usando la norma asimétrica (círculos rojos) y simétrica (círculos azules), con respecto al número de iteraciones.

Por otro lado, las gráficas de la fase  $\theta$  de la brecha superconductor, muestran que este barre el rango de valores de  $-\pi$  a  $\pi$  mostrando una discontinuidad de  $2\pi$ , lo cual indica que el flujo magnético a través del vórtice es igual a un fluxón, tal y como se esperaría. También obsérvese que la discontinuidad toma una dirección preferencial dependiendo de la elección de  $\vec{A}$ .

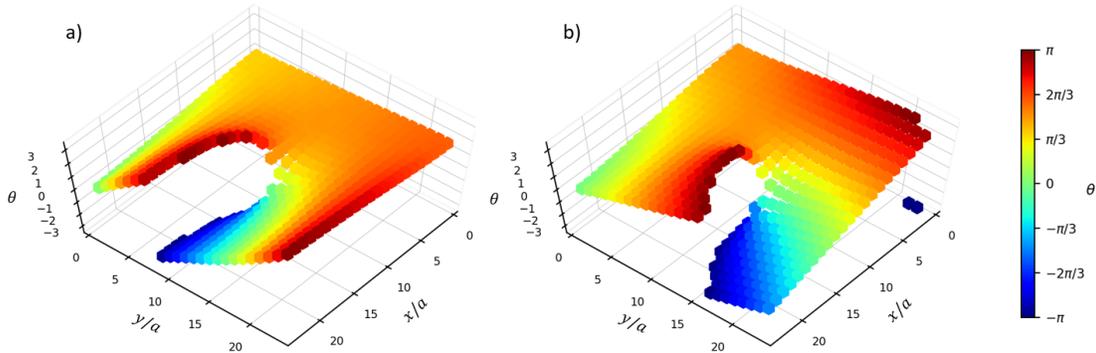


Figura 3.5: Fase ( $\theta$ ) de la brecha superconductor para (a) la norma simétrica  $\vec{A}_2$  después de 300 iteraciones y (b) la norma asimétrica  $\vec{A}_2$  después de 50 iteraciones con los mismos parámetros de la figura 3.3.

Habiendo hecho esto, hemos estudiado las soluciones para la misma nanoestructura cuadrada para diferentes valores del flujo  $\Phi_B$  que atraviesa el sistema. En la Figura 3.5 se muestra la magnitud de la brecha en unidades de la integral de salto  $|t|$  para cuatro valores distintos del campo magnético. Se observa que el número de vórtices coincide con el número de cuantos de flujo magnético  $\Phi_0$ .

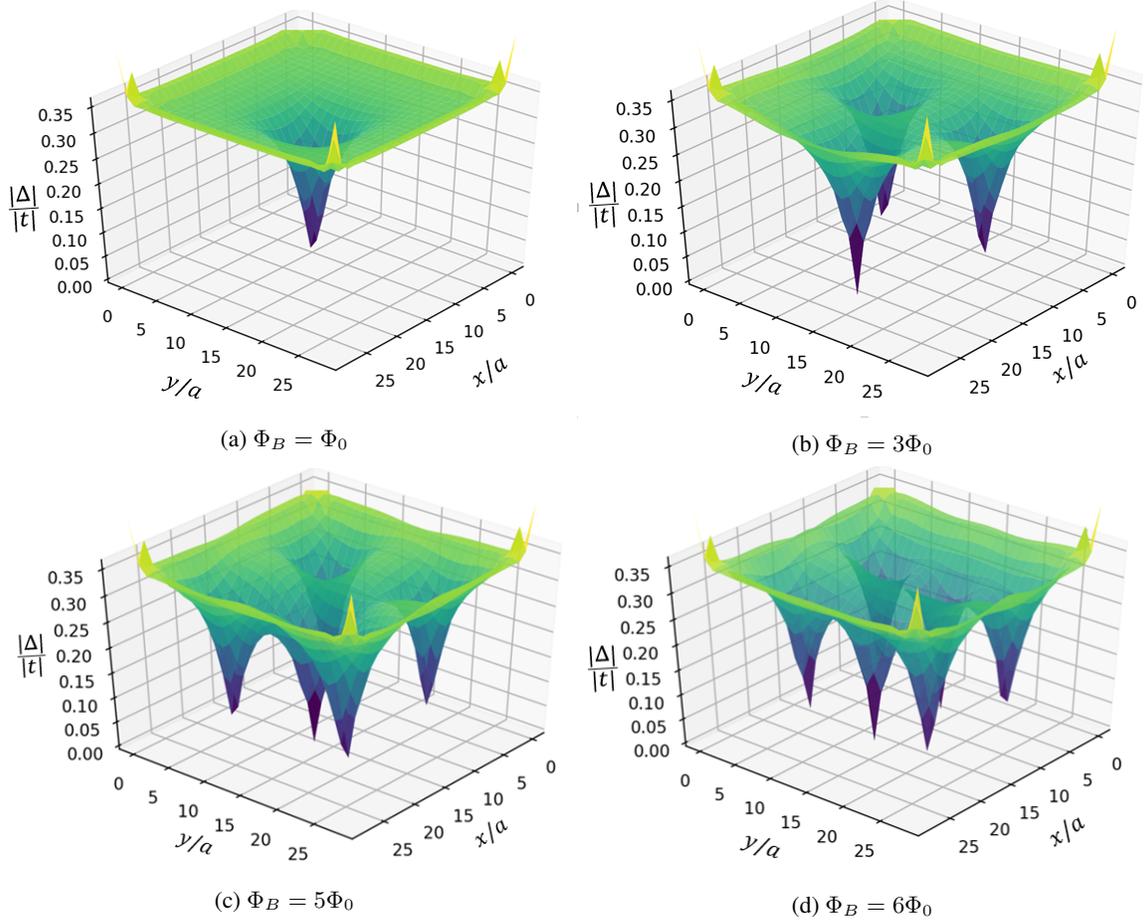


Figura 3.6: Distribución espacial de la magnitud de la brecha superconductora ( $|\Delta|/|t|$ ) para una nanoestructura de  $29 \times 29$  sitios con  $V = 2|t|$ ,  $t' = -0.15|t|$  y  $k_B T = 0.15|t|$  conteniendo (a) 1, (b) 3, (c) 5 y (d) 6 cuantos de flujo.

Del mismo modo en las figuras 3.6, 3.7, 3.8 y 3.9 se muestra la distribución de supercorrientes obtenidas a partir de las ecuaciones (3.118) y (3.119) y la fase del parámetro de orden correspondientes a las figuras 3.6 (a), (b), (c) y (d) respectivamente.

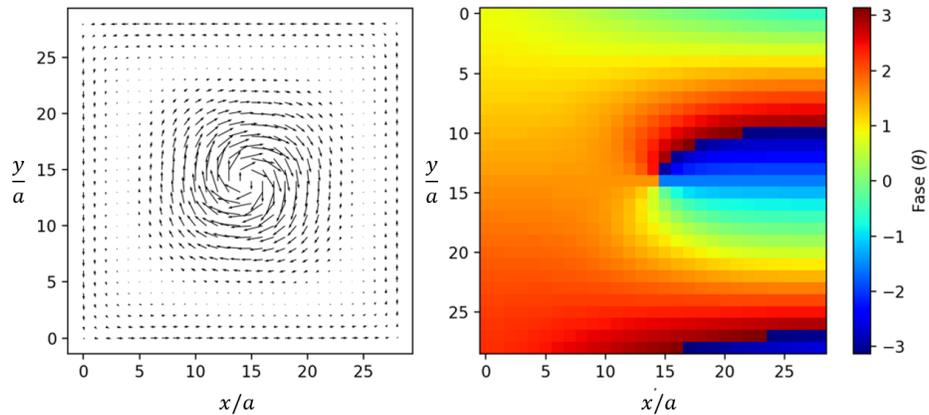


Figura 3.7: Distribución de (panel izquierdo) supercorriente  $\vec{J}$  en unidades de  $e|t|/\hbar$  y (panel derecho) fase del parámetro de orden para una nanoestructura de  $29 \times 29$  sitios con  $V = 2|t|$ ,  $k_B T = 0.16|t|$ ,  $t' = -0.15|t|$  y  $\Phi = \Phi_0$ .

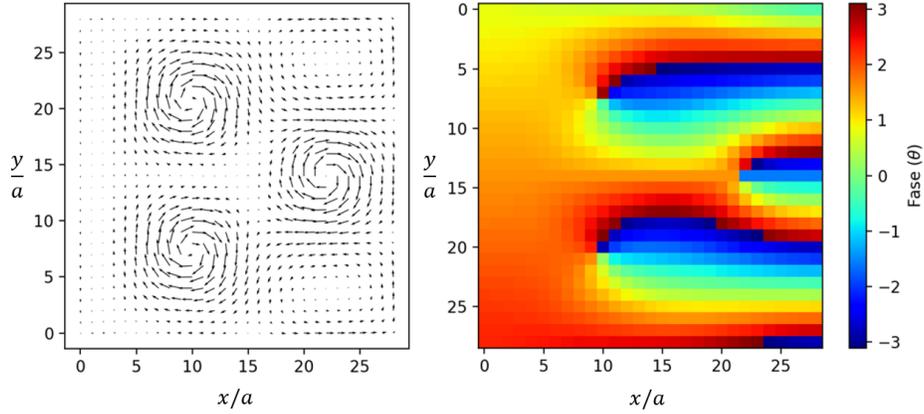


Figura 3.8: Distribución de (panel izquierdo) supercorriente  $\vec{J}$  en unidades de  $e|t|/\hbar$  y (panel derecho) fase del parámetro de orden para una nanoestructura de  $29 \times 29$  sitios con  $V = 2|t|$ ,  $k_B T = 0.16|t|$ ,  $t' = -0.15|t|$  y  $\Phi = 3\Phi_0$ .

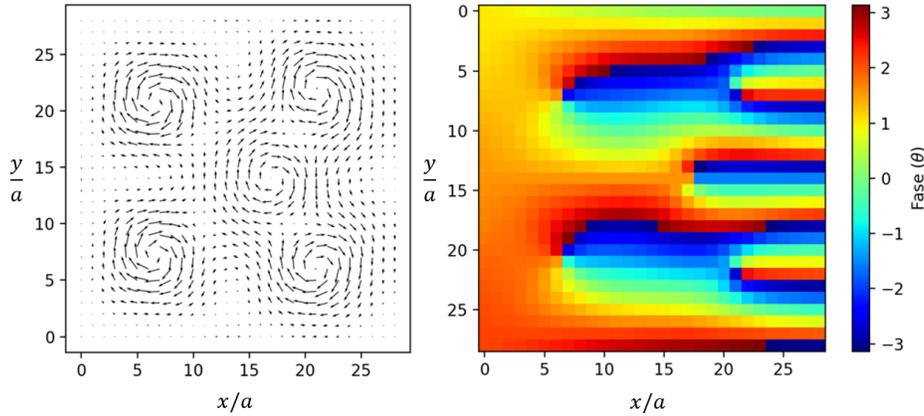


Figura 3.9: Distribución de (panel izquierdo) supercorriente  $\vec{J}$  en unidades de  $e|t|/\hbar$  y (panel derecho) fase del parámetro de orden para una nanoestructura de  $29 \times 29$  sitios con  $V = 2|t|$ ,  $k_B T = 0.16|t|$ ,  $t' = -0.15|t|$  y  $\Phi = 5\Phi_0$ .

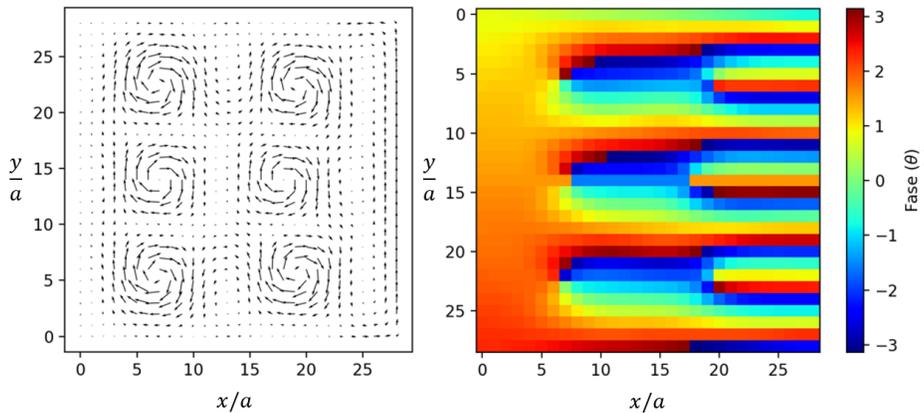


Figura 3.10: Distribución de (panel izquierdo) supercorriente  $\vec{J}$  en unidades de  $e|t|/\hbar$  y (panel derecho) fase del parámetro de orden para una nanoestructura de  $29 \times 29$  sitios con  $V = 2|t|$ ,  $k_B T = 0.16|t|$ ,  $t' = -0.15|t|$  y  $\Phi = 6\Phi_0$ .

Nótese que la distribución de supercorrientes indica la presencia de vórtices en los cuatro casos anteriormente mostrados. También se observa que la intensidad de corriente decrece conforme se aumenta la distancia al centro de los vórtices. Dichos centros coinciden con los puntos donde se anula la brecha superconductora, tal y como se esperaría. Por otro lado, las gráficas de la fase revelan una discontinuidad de  $2\pi$  en cada vórtice, confirmando que el flujo que contiene cada uno es igual a  $\Phi_0$ .

En la Figura 3.10 se muestra el valor de la brecha promedio  $\frac{1}{N} \sum_i \frac{|\Delta_i|}{|t|}$  con  $N = N_x \times N_y$ , como función de la temperatura. Obsérvese que en todos los casos existe una temperatura crítica a partir de la cual el parámetro de orden se anula, indicando la desaparición de la superconductividad. Dicha temperatura crítica decrece conforme aumenta el campo magnético. Del mismo modo, el valor máximo del parámetro de orden a  $T = 0K$  decrece conforme aumenta el campo magnético.

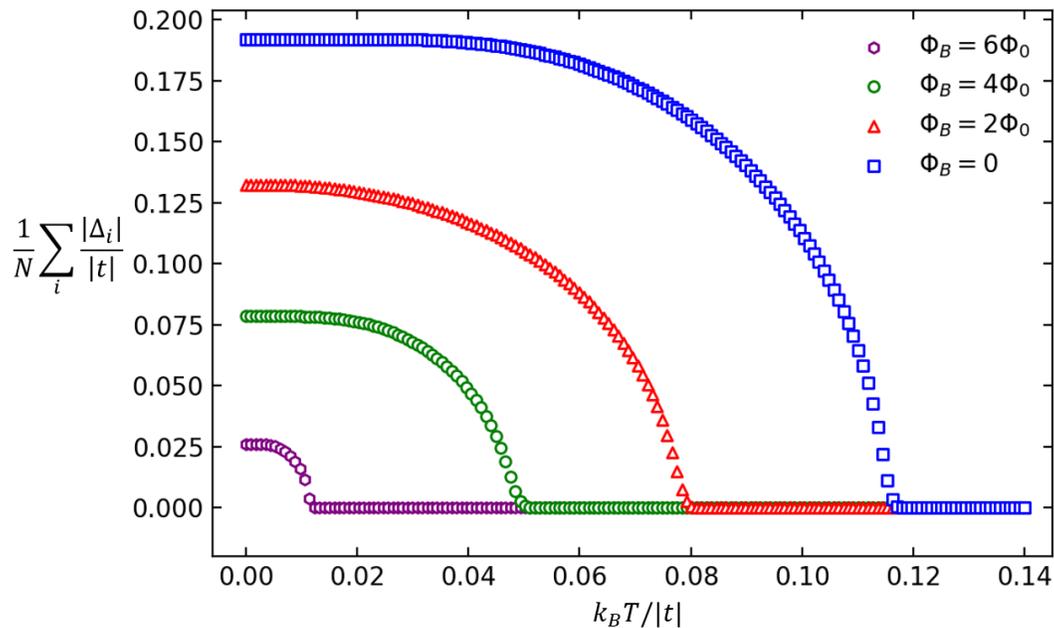


Figura 3.11: Dependencia de la brecha superconductora ( $\Delta$ ) de la temperatura ( $k_B T / |t|$ ) para distintos valores de flujo magnético a través de una nanoestructura de  $12 \times 12$  sitios.

Finalmente, en la Figura 3.11 se muestran las capacidades caloríficas ( $C_v$ ) para los distintos valores del campo mostrado en la Figura 3.10. Obsérvese que cada gráfica muestra una discontinuidad del calor específico, indicando una transición de fase de segundo orden del estado superconductor al estado normal en la temperatura crítica.

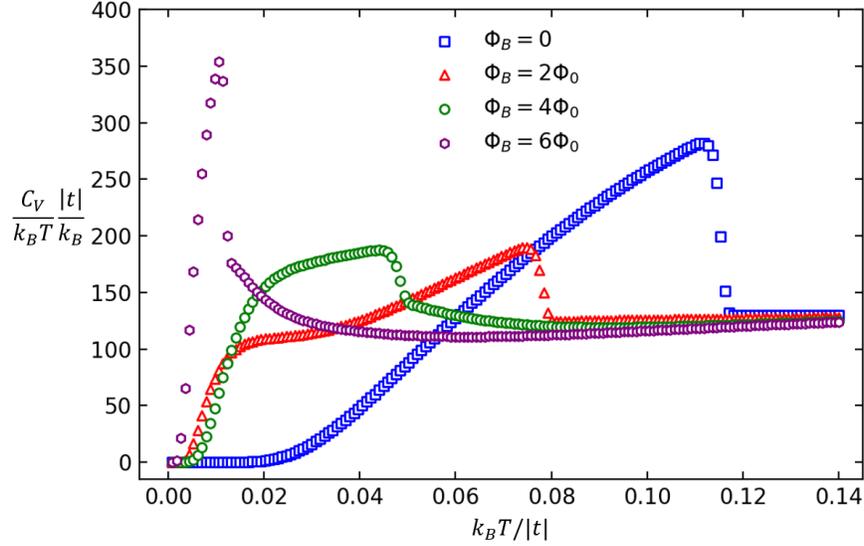


Figura 3.12: Capacidad calorífica como función de temperatura ( $k_B T / |t|$ ) para distintos valores de flujo magnético a través de una nanoestructura de  $12 \times 12$  sitios.

### 3.9. Longitud de coherencia en nanoestructuras cuadradas

Una vez determinada la geometría de los vórtices magnéticos es posible obtener la longitud de coherencia introducida en las secciones 1.2 y 1.4, la cual se entiende como la distancia característica donde el sistema pasa del estado superconductor al estado normal o el tamaño promedio de los pares de Cooper. Para ello se propuso que alrededor del centro de los vórtices, la superficie de la brecha tiene la siguiente forma

$$\Delta(\vec{r}) = \Delta_0(1 - e^{-r/\xi}), \quad (3.127)$$

donde  $\Delta_0$  es el valor homogéneo del parámetro de orden en ausencia de campo magnético,  $r$  es la distancia desde el centro del vórtice y  $\xi$  es la longitud de coherencia. Para determinar  $\xi$  se hizo un ajuste de mínimos cuadrados de la superficie del vórtice respecto a la función (3.127) tal y como se muestra en la Figura 3.13.

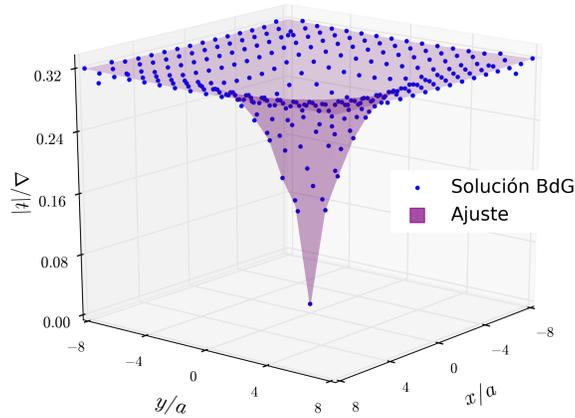


Figura 3.13: Cálculo numérico de la brecha superconductora (círculos azules) y ajuste por mínimos cuadrados de los puntos respecto a la superficie dada por la ecuación (3.128) (superficie morada).

Primero estudiaremos la dependencia de la longitud de coherencia respecto a la temperatura para distintos valores de la constante de acomplamiento  $V$ . Después repetiremos los cálculos para distintas temperaturas y distintas constantes  $V$ . Finalmente, mediante un ajuste lineal, se determinó el exponente crítico de la dependencia de la longitud de coherencia respecto a la temperatura reducida  $\tau = (T_c - T)/T_c$ , bajo el supuesto de que esta sigue una ley de potencias de la forma

$$\xi = A\tau^\alpha, \quad (3.128)$$

cuando  $\tau \approx 0$  (con  $A$  una constante de proporcionalidad).

La teoría de Ginzburg-Landau establece que  $\alpha = -1/2$  [Thinkham, 1996] para temperaturas cerca de la temperatura crítica, o bien, para  $\tau$  cercana a cero. Los resultados de los ajustes se muestran en la Figura 3.15 y la Tabla 3.1. Obsérvese que el exponente  $\alpha$  se encuentra muy cerca del valor esperado.

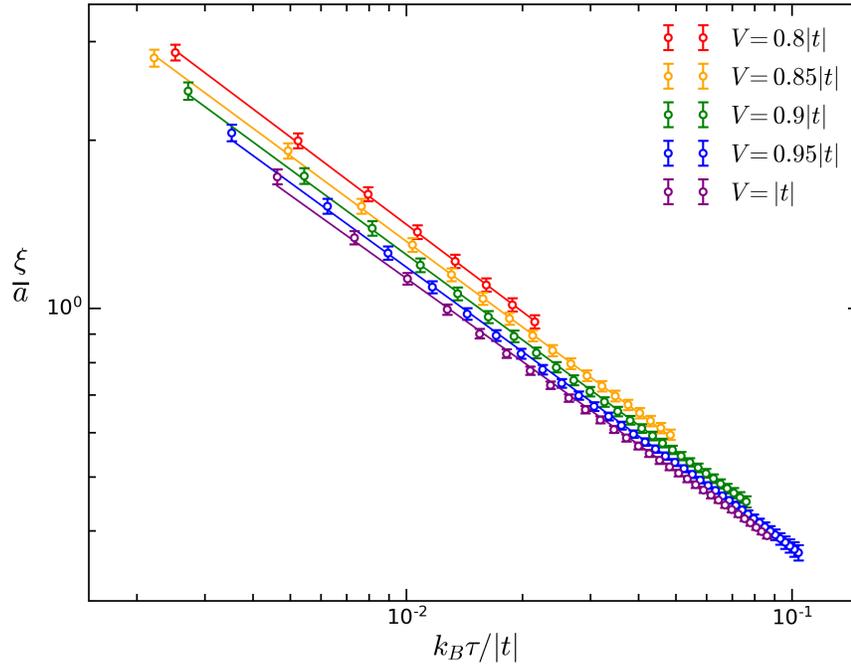


Figura 3.14: Longitud de coherencia  $\xi/a$  como función de la temperatura reducida  $\tau = (T_c - T)/T_c$  para distintos valores de la constante de interacción  $V$  en una nanoestructura de  $9 \times 9$  sitios con  $t' = -0.15|t|$  y  $\Phi_B = \Phi_0$ . Las líneas continuas representan el ajuste lineal de cada una de las curvas.

Tabla 3.1: Exponente crítico  $\alpha$  y constante de proporcionalidad  $A$  obtenida de la Figura 3.14.

$V$	$\alpha$	$\log(A)$
$0.8 t $	$-0.51897 \pm 0.00568$	$-2.04382 \pm 0.01389$
$0.85 t $	$-0.50864 \pm 0.00668$	$-2.06627 \pm 0.00663$
$0.9 t $	$-0.50642 \pm 0.00700$	$-2.11064 \pm 0.00663$
$0.95 t $	$-0.50170 \pm 0.00456$	$-2.14050 \pm 0.00568$
$1.0 t $	$-0.49379 \pm 0.00871$	$-2.15022 \pm 0.00924$

También se investigó la dependencia de la longitud de coherencia respecto al campo magnético externo mediante dos métodos distintos; el primero consistió en variar el tamaño de la nanoestructura cuadrada manteniendo el flujo igual a  $\Phi_0$  para asegurar la formación de un solo vórtice. Dicha constricción induce una variación en el campo externo igual a

$$B_0 = \frac{\Phi_0}{(N_x a)^2} \quad (3.129)$$

es decir, la magnitud del campo externo disminuye cuadráticamente al aumentar el tamaño de la nanoestructura. Los resultados se muestran en la Figura 3.15, donde se observa en (a) que al crecer el tamaño de la nanoestructura la brecha superconductor  $\Delta$  aumenta su valor en  $x = 0$ .

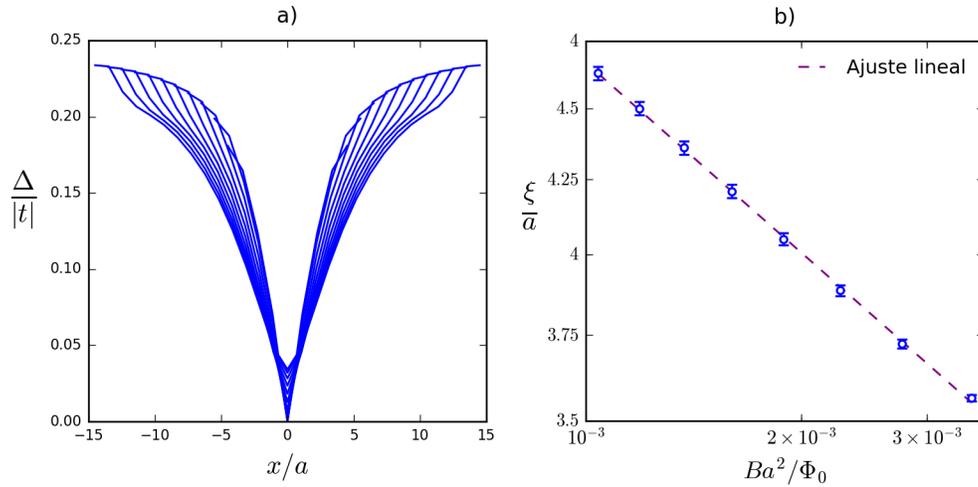


Figura 3.15: (a) Perfil de los vórtices magnéticos a lo largo del eje  $x$  para 9 tamaños distintos de la nanoestructura cuadrada y (b) ajuste de mínimos cuadrados de la longitud de coherencia en el campo.

Obsérvese que el radio del vórtice crece conforme disminuye el campo, esto concuerda con el hecho de que a mayor campo, penetran más vórtices al sistema, agrupándose de forma más ajustada y volviéndose más estrechos.

Al hacer un ajuste lineal de la longitud de coherencia para distintos tamaños de la nanoestructura respecto a una ley de potencias  $\xi \propto B^\beta$ , se observa que.

$$\beta = -0.22411 \pm 0.00112. \quad (3.130)$$

Una forma alternativa de obtener la longitud de coherencia consiste en seguir el procedimiento encontrado en [Klein, 2006], en la que se relaciona la proporción de excitaciones electrónicas del estado base superconductor con la densidad electrónica total y se establece una relación entre éste y el coeficiente de Somerfeld  $\gamma$  definido como

$$\gamma = \lim_{T \rightarrow 0} \frac{C_v(B) - C_v(0)}{T}, \quad (3.131)$$

donde  $C_V$  es la capacidad calorífica a volumen constante. Existe una relación entre el coeficiente de Somerfeld y la longitud de coherencia dada por [Klein, 2006],

$$\gamma \propto \left( \frac{\xi}{a_0} \right)^2, \quad (3.132)$$

con  $a_0$  la distancia entre vórtices. Para ello se calculó el calor específico sin campo y con campo constreñido a un fluxón en sistemas cuadrados de 5 tamaños distintos, una vez hecho esto se obtuvo la diferencia entre ambas cantidades y se analizó su comportamiento para un rango de temperaturas cercanas al cero lo cual nos permitió determinar la tendencia de  $\Delta C_v/T$ . Para considerar los efectos del tamaño del sistema, se usó el calor específico  $c_v = C_v/N_x^2$  o capacidad calorífica por unidad de área. Los resultados se muestran en la Figura 3.16.

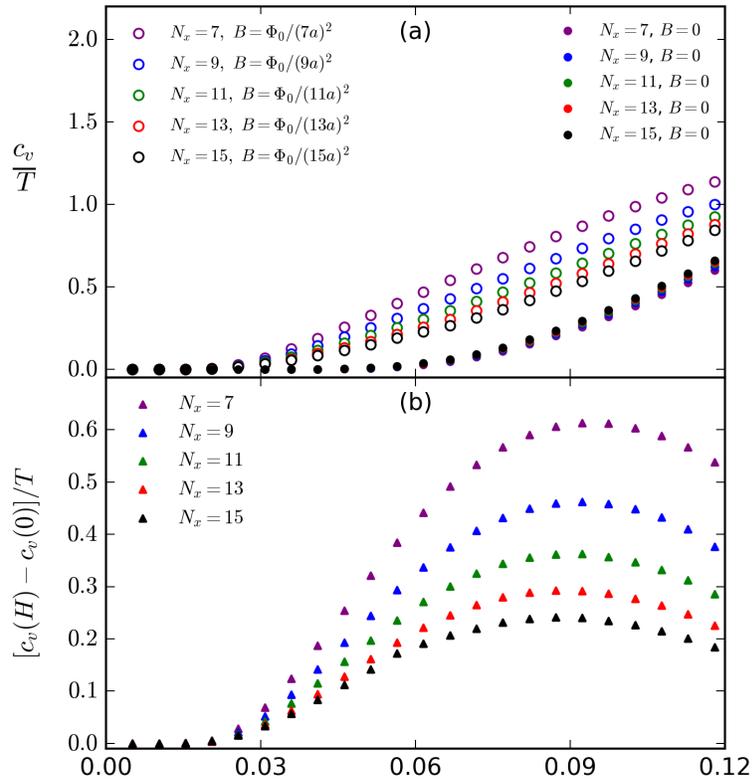


Figura 3.16: (a) Calor específico para 5 nanoestructuras con  $N_x$  átomos por lado en presencia de campo magnético (círculos abiertos) y sin campo (círculos sólidos). (b) Diferencia entre el calor específico con y sin campo para los 5 tamaños de nanoestructuras mostradas en (a).

Una vez hecho esto se determinó la relación entre  $\Delta c_v/T$  y  $B$  a  $T$  constante, usando un ajuste de mínimos cuadrados respecto a la función

$$\frac{\Delta c_v}{T} = \Gamma B^\delta. \quad (3.133)$$

Los resultados se muestran en la Figura 3.17. Se observó que para el valor mínimo de temperatura obtenido, el valor del exponente  $\delta$  era de

$$\delta = 0.5516 \pm 0.0077 \quad (3.134)$$

con esto, uno obtiene que

$$\xi \propto \sqrt{\frac{\gamma}{B}} \propto \sqrt{\frac{B^{0.551}}{B}} = B^{-0.225} \quad (3.135)$$

con lo que se comprueba que el exponente de la dependencia de la longitud de coherencia respecto al campo es bastante similar al obtenido en [Klein, 2006].

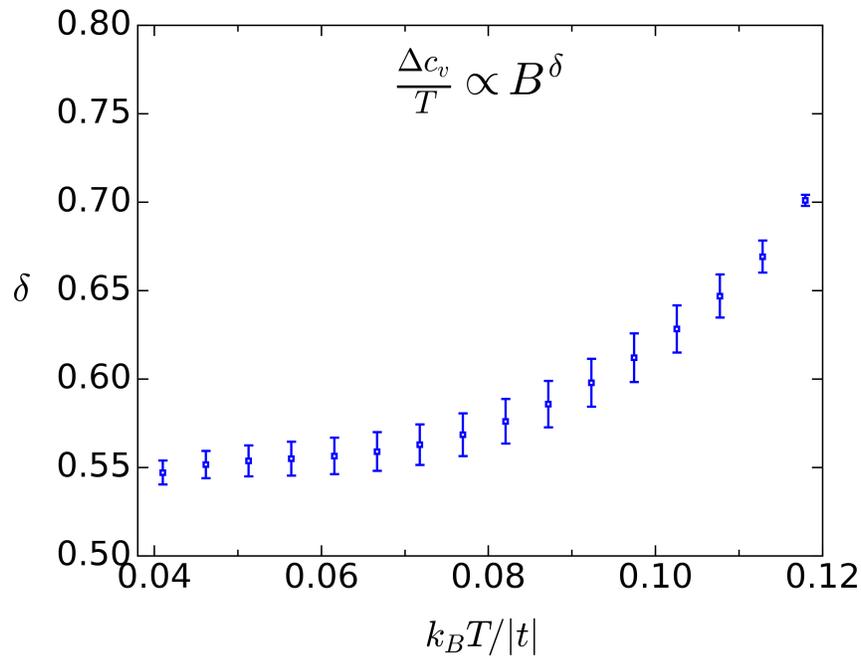


Figura 3.17: Exponente  $\delta$  de la dependencia de  $\Delta c_v/T$  respecto al campo externo  $H$  como función de la temperatura  $k_B T/|t|$ .

### 3.10. Vórtices magnéticos en una red cuadrada periódica

En esta sección se estudian las soluciones de las ecuaciones BdG para una red periódica. Primero se obtuvo la brecha para una red periódica en una celda unitaria magnética de  $60 \times 30$  sitios, en una malla de  $12 \times 24$  puntos en la primera zona de Brillouin. La superficie de la brecha se muestra en la Figura 3.18. Obsérvese que los vórtices obtenidos se encuentran mucho más definidos que los presentados en la sección 3.8, lo cual se debe tanto al tamaño de la celda unitaria magnética como a la discretización del espacio recíproco.

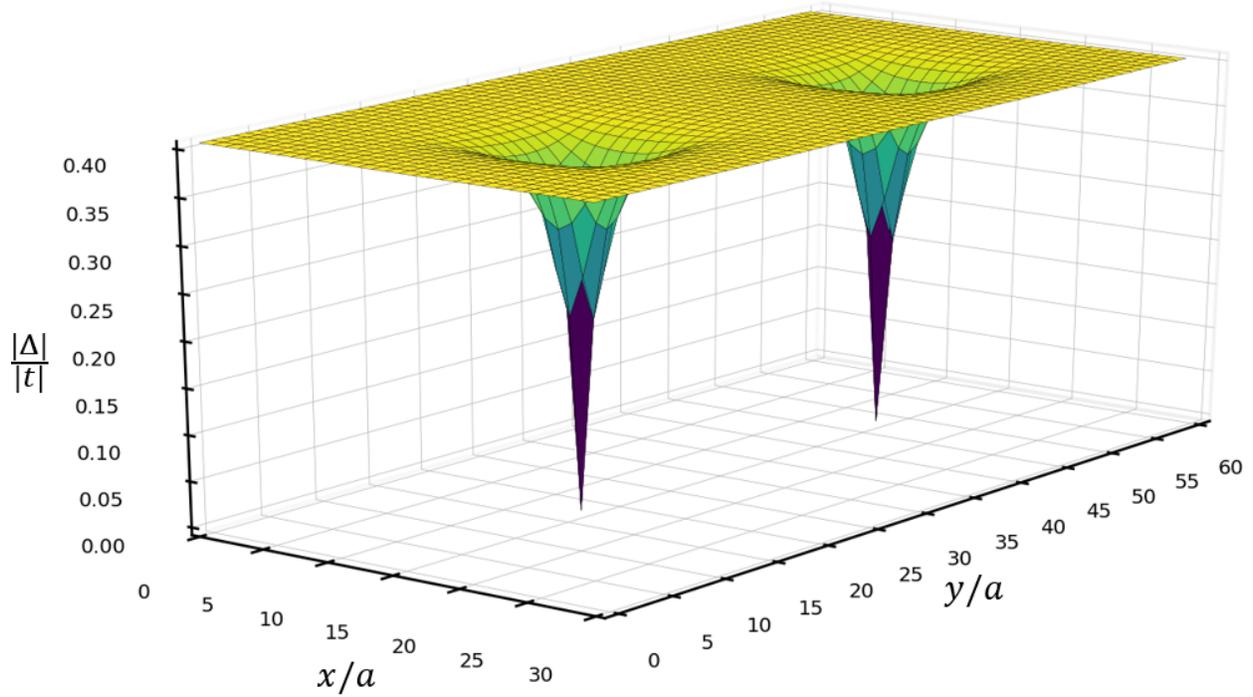


Figura 3.18: Parámetro de orden superconductor ( $|\Delta|/|t|$ ) en una celda unitaria magnética de  $30 \times 60$  sitios para  $V = 2|t|$ ,  $t' = -0.15|t|$ ,  $k_B T = 0.001|t|$  y  $\Phi_B = 2\Phi_0$ .

Del mismo modo, se calculó el promedio de la brecha superconductor  $\frac{1}{N} \sum_i \frac{\Delta_i}{|t|}$  para una celda unitaria magnética de  $12 \times 12$  sitios, los resultados se muestran en la Figura 3.19.

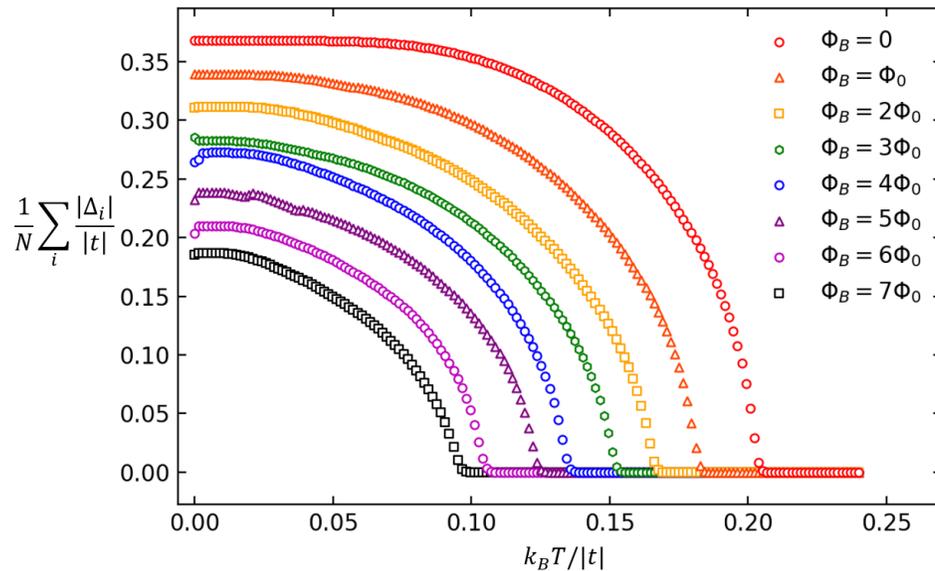


Figura 3.19: Promedio de la brecha superconductor en una celda unitaria magnética de  $12 \times 12$  sitios como función de la temperatura para distintos valores de  $\Phi_B$  con  $V = 2|t|$  y  $t' = -0.15|t|$ .

# Conclusiones

En esta tesis hemos estudiado la superconductividad en nanoestructuras y redes bidimensionales empleando las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes y el modelo de Hubbard atractivo con campo magnético mediante la sustitución de Peierls. Se pueden resumir los resultados principales del presente trabajo como sigue

1. La elección de la norma del potencial vectorial  $\vec{A}$  no cambia la solución autoconsistente de las ecuaciones BdG, sin embargo, dicha elección sí afecta el tiempo, el cual más corto para el potencial vectorial asimétrico  $\vec{A}_1$ .
2. El análisis de la fase de la brecha superconductora revela que el flujo de cada vórtice está cuantizado.
3. La distribución de corriente circula los vórtices en sentido horario ya que tienden a generar una magnetización que anula el campo magnético externo en la dirección  $z$ .
4. Tanto el parámetro de orden como las capacidades caloríficas muestran una transición de fase de segundo orden en el calor específico, lo cual es consistente con el hecho de que estamos estudiando superconductores de tipo II en presencia de campo magnético [Gennes, 1999].
5. La longitud de coherencia obtenida a partir del perfil de los vórtices presentan una buena consistencia con la teoría G-L respecto a la temperatura.
6. Se observa que la dependencia de la longitud de coherencia respecto al campo externo tiene buena concordancia con los resultados experimentales [Klein, 2006].

Cabe mencionar que el tiempo de cómputo es largo debido al proceso de autoconsistencia. La formación de vórtices es muy sensible a los parámetros del sistema por lo que fue difícil obtenerlos. Se propone extender el estudio de la dependencia de la longitud de coherencia respecto al campo para el caso de redes periódicas, así como repetir los cálculos para superconductores con simetría d.

# Apéndice A

## Valores esperados del hamiltoniano reducido

En este apéndice calculamos el valor esperado del hamiltoniano reducido ( $\hat{H}_R$ ) dado por (2.41)

$$\hat{H}_R = \sum_{\vec{k}, \sigma} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \sigma} + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow} = \hat{K} + \hat{H}_{int}. \quad (\text{A.1})$$

Notamos que  $\hat{K}$  se puede reescribir como

$$\hat{K} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \sigma} = \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \left( \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow} + \hat{c}_{\vec{k}, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \downarrow} \right) = \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \left( \hat{n}_{\vec{k}, \uparrow} + \hat{n}_{-\vec{k}, \downarrow} \right). \quad (\text{A.2})$$

Obsérvese que los operadores de creación de pares conmutan para pares con distinto vector de onda  $\vec{k} \neq \vec{k}'$ , en efecto

$$\hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}', \downarrow}^\dagger = -\hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \underbrace{\hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \downarrow}^\dagger}_{\leftrightarrow} \hat{c}_{\vec{k}', \downarrow}^\dagger = -\hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger \underbrace{\hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}', \downarrow}^\dagger}_{\leftrightarrow} \hat{c}_{\vec{k}, \downarrow}^\dagger = \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger \underbrace{\hat{c}_{\vec{k}', \downarrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger}_{\leftrightarrow} \hat{c}_{\vec{k}, \downarrow}^\dagger. \quad (\text{A.3})$$

Así,

$$\begin{aligned} \hat{K} |\Psi_{BCS}\rangle &= \sum_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} (\hat{n}_{\vec{k}, \uparrow} + \hat{n}_{-\vec{k}, \downarrow}) (u_{\vec{k}} + \nu_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger) \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} (u_{\vec{k}'} + \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow}^\dagger) |0\rangle \\ &= \sum_{\vec{k}} 2\nu_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} (u_{\vec{k}'} + \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow}^\dagger) |0\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

por lo que

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{BCS} | \hat{K} | \Psi_{BCS} \rangle &= \langle 0 | \prod_{\vec{k}''} (u_{\vec{k}''} + \nu_{\vec{k}''} \hat{c}_{-\vec{k}'', \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'', \uparrow}) \sum_{\vec{k}} 2\nu_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} (u_{\vec{k}'} + \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow}^\dagger) |0\rangle \\ &= \sum_{\vec{k}} \langle 0 | \prod_{\vec{k}'' \neq \vec{k}} (u_{\vec{k}''} + \nu_{\vec{k}''} \hat{c}_{-\vec{k}'', \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'', \uparrow}) (u_{\vec{k}} + \nu_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}) 2\nu_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} (u_{\vec{k}'} + \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow}^\dagger) |0\rangle \\ &= \sum_{\vec{k}} \langle 0 | (u_{\vec{k}} + \nu_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}) 2\nu_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \prod_{\vec{k}'' \neq \vec{k}} (u_{\vec{k}''} + \nu_{\vec{k}''} \hat{c}_{-\vec{k}'', \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'', \uparrow}) \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} (u_{\vec{k}'} + \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow}^\dagger) |0\rangle \\ &= \sum_{\vec{k}} \langle 0 | (u_{\vec{k}} + \nu_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}) 2\nu_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} (u_{\vec{k}'} + \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}) (u_{\vec{k}'} + \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow}^\dagger) |0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Entonces

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi_{BCS} | \hat{K} | \Psi_{BCS} \rangle \\
&= \sum_{\vec{k}} 2\nu_{\vec{k}} \xi_{\vec{k}} \langle 0 | \left[ u_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger + \nu_{\vec{k}} \left( 1 - \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow} \right) \left( 1 - \hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},\uparrow} \right) \right] \\
&\times \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left( u_{\vec{k}'}^2 + u_{\vec{k}'} \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger + u_{\vec{k}'} \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow} + \nu_{\vec{k}'}^2 \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle \\
&= \sum_{\vec{k}'} 2\nu_{\vec{k}'}^2 \xi_{\vec{k}'} \langle 0 | \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left( u_{\vec{k}'}^2 + u_{\vec{k}'} \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger + u_{\vec{k}'} \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow} + \nu_{\vec{k}'}^2 \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle \\
&= \sum_{\vec{k}'} 2\nu_{\vec{k}'}^2 \xi_{\vec{k}'} \langle 0 | \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left( u_{\vec{k}'}^2 + u_{\vec{k}'} \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger + \nu_{\vec{k}'}^2 (1 - \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}) (1 - \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}) \right) | 0 \rangle \tag{A.6} \\
&= \sum_{\vec{k}} 2\nu_{\vec{k}}^2 \xi_{\vec{k}} \langle 0 | \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left( u_{\vec{k}'}^2 + u_{\vec{k}'} \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger + \nu_{\vec{k}'}^2 \right) | 0 \rangle \\
&= \sum_{\vec{k}'} 2\nu_{\vec{k}'}^2 \xi_{\vec{k}'} \langle 0 | \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left( u_{\vec{k}'}^2 + \nu_{\vec{k}'}^2 \right) | 0 \rangle \\
&= \sum_{\vec{k}} 2\nu_{\vec{k}}^2 \xi_{\vec{k}}.
\end{aligned}$$

Del mismo modo calculamos el valor esperado de  $\hat{H}_{int}$  observando primero que

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int} &= \sum_{\vec{k}' \neq \vec{k}} V_{\vec{k}', \vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow} + \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}, \vec{k}} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow} \\
&= \sum_{\vec{k}' \neq \vec{k}} V_{\vec{k}', \vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow} + \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}, \vec{k}} \hat{n}_{\vec{k},\uparrow} \hat{n}_{-\vec{k},\downarrow} \\
&= \hat{H}_{int}^{(1)} + \hat{H}_{int}^{(2)}.
\end{aligned} \tag{A.7}$$

Así, evaluamos  $|\Psi_{BCS}\rangle$  en cada uno de los términos como sigue,

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int}^{(1)} |\Psi_{BCS}\rangle &= \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow} \left( u_{\vec{k}} + \nu_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\vec{q} \neq \vec{k}} \left( u_{\vec{q}} + \nu_{\vec{q}} \hat{c}_{\vec{q},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{q},\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle \\
&= \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}'} V_{\vec{k}', \vec{k}} \nu_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger \prod_{\vec{q} \neq \vec{k}} \left( u_{\vec{q}} + \nu_{\vec{q}} \hat{c}_{\vec{q},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{q},\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle
\end{aligned} \tag{A.8}$$

por lo que

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_{int}^{(1)} | \Psi_{BCS} \rangle &= \sum_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \langle 0 | V_{\vec{k}', \vec{k}} \nu_{\vec{k}} \left( u_{\vec{k}'} + \nu_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow} \right) \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \\
&\times \prod_{\vec{q}' \neq \vec{k}'} \left( u_{\vec{q}'} + \nu_{\vec{q}'} \hat{c}_{-\vec{q}'\downarrow} \hat{c}_{\vec{q}'\uparrow} \right) \prod_{\vec{q} \neq \vec{k}} \left( u_{\vec{q}} + \nu_{\vec{q}} \hat{c}_{\vec{q}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{q}\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle \\
&= \sum_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \langle 0 | V_{\vec{k}', \vec{k}} \nu_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}'} \left( u_{\vec{k}} + \nu_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \right) \left( u_{\vec{k}'} + \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) \\
&\times \prod_{\vec{q} \neq \vec{k}, \vec{k}'} \left( u_{\vec{q}} + \nu_{\vec{q}} \hat{c}_{-\vec{q}\downarrow} \hat{c}_{\vec{q}\uparrow} \right) \left( u_{\vec{q}} + \nu_{\vec{q}} \hat{c}_{\vec{q}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{q}\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle \\
&= \sum_{\vec{k}' \neq \vec{k}} V_{\vec{k}', \vec{k}} \nu_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}'} u_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} \langle 0 | \prod_{\vec{q} \neq \vec{k}, \vec{k}'} \left( u_{\vec{q}} + \nu_{\vec{q}} \hat{c}_{-\vec{q}\downarrow} \hat{c}_{\vec{q}\uparrow} \right) \left( u_{\vec{q}} + \nu_{\vec{q}} \hat{c}_{\vec{q}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{q}\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle \\
&= \sum_{\vec{k}' \neq \vec{k}} V_{\vec{k}', \vec{k}} \nu_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}'} u_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} \langle 0 | \prod_{\vec{q} \neq \vec{k}, \vec{k}'} \left( u_{\vec{q}}^2 + \nu_{\vec{q}}^2 \right) | 0 \rangle \\
&= \sum_{\vec{k}' \neq \vec{k}} V_{\vec{k}', \vec{k}} \nu_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}'} u_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} .
\end{aligned} \tag{A.9}$$

Del mismo modo

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int}^{(2)} | \Psi_{BCS} \rangle &= \sum_{\vec{k}} V_{\vec{k}, \vec{k}} \hat{n}_{\vec{k}\uparrow} \hat{n}_{-\vec{k}\downarrow} \left( u_{\vec{k}} + \nu_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left( u_{\vec{k}'} + \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle \\
&= \sum_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}} V_{\vec{k}, \vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \prod_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \left( u_{\vec{k}'} + \nu_{\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}'\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle,
\end{aligned} \tag{A.10}$$

esto tiene la misma forma que (A.4) por lo que el resultado sería

$$\langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_{int}^{(2)} | \Psi_{BCS} \rangle = \sum_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}}^2 V_{\vec{k}, \vec{k}} . \tag{A.11}$$

# Apéndice B

## Solución asintótica de integrales

En este apéndice se demostrará que

$$\int_0^z \frac{\tanh(x)}{x} dx \approx \ln(4e^\gamma z/\pi), \quad (\text{B.1})$$

cuando  $z \gg 1$ , donde  $\gamma$  es la constante Euler-Mascheroni definida como

$$\gamma \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \left[ \sum_{k=0}^n \frac{1}{k} - \ln(n) \right] = \int_0^\infty \left[ \frac{1}{x(1+x)} - \frac{e^{-x}}{x} \right] dx. \quad (\text{B.2})$$

Al manipular la integral (B.1), obtenemos

$$\begin{aligned} \int_0^z \frac{\tanh(x)}{x} dx &= \int_0^1 \frac{\tanh(x)}{x} dx + \int_1^z \left[ \frac{1}{x} - \frac{2e^{-x}}{x(e^x + e^{-x})} \right] dx \\ &= \underbrace{\int_0^1 \frac{\tanh(x)}{x} dx}_{I_1} + \ln(z) - \underbrace{\int_1^\infty \frac{2e^{-x}}{x(e^x + e^{-x})} dx}_{I_2} + \underbrace{\int_z^\infty \frac{2e^{-x}}{x(e^x + e^{-x})} dx}_{I_3}. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

En el límite cuando  $z \rightarrow \infty$ ,  $I_3 \rightarrow 0$ , mientras que

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^1 \frac{1}{x} \frac{1 - e^{-2x}}{1 + e^{-2x}} dx = \int_0^1 \frac{1 - e^{-2x}}{x} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k e^{-2kx} dx \\ &= \int_0^1 \frac{1 - e^{-2x}}{x} dx + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_0^1 \frac{e^{-2kx} - e^{-2(k+1)x}}{x} dx. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Como  $z > 0$ , empleamos la siguiente relación para la función integral exponencial Ei,

$$\begin{aligned} \text{Ei}(-z) &\equiv \int_{-\infty}^{-z} \frac{e^x}{x} dx = \int_\infty^z \frac{e^{-x}}{x} dx = - \int_z^\infty \frac{e^{-x}}{x} dx \\ &= \int_0^z \frac{e^{-x}}{x} dx - \int_0^\infty \frac{e^{-x}}{x} dx + \int_0^\infty \frac{dx}{x} - \int_1^\infty \frac{dx}{x} - \int_0^1 \frac{dx}{x} + \int_0^z \frac{dx}{x} - \int_0^z \frac{dx}{x} \\ &= \int_0^\infty \frac{dx}{x} - \int_0^\infty \frac{dx'}{1+x'} - \int_0^\infty \frac{e^{-x}}{x} dx + \int_1^0 \frac{dx}{x} + \int_0^z \frac{dx}{x} - \int_0^z \frac{dx}{x} + \int_0^z \frac{e^{-x}}{x} dx \\ &= \int_0^\infty \left[ \frac{1}{x(1+x)} - \frac{e^{-x}}{x} \right] dx + \int_1^z \frac{dx}{x} - \int_0^z \frac{1 - e^{-x}}{x} dx \\ &= \gamma + \ln(z) - \int_0^z \frac{1 - e^{-x}}{x} dx, \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

donde se usó el cambio de variable  $x' = x - 1$  en la cuarta integral del segundo renglón de (B.5) y la definición (B.2) para  $\gamma$ .

Así, al reescribir (B.4) en términos de la función  $Ei$ , obtenemos

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int_0^1 \frac{1 - e^{-2x}}{x} dx + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left( \int_0^1 \frac{1 - e^{-(2k+1)x}}{x} dx - \int_0^1 \frac{1 - e^{-2kx}}{x} dx \right) \\
&= \int_0^2 \frac{1 - e^{-x}}{x} dx + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left( \int_0^{2k+1} \frac{1 - e^{-x}}{x} dx - \int_0^{2k} \frac{1 - e^{-x}}{x} dx \right) \\
&= \gamma + \ln(2) - Ei(-2) + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[ Ei(-2k) - Ei(-2(k+1)) + \ln\left(\frac{k+1}{k}\right) \right] \\
&= \gamma + \ln(2) - 2Ei(-2) + \sum_{k=2}^{\infty} (-1)^k Ei(-2k) - \sum_{k=2}^{\infty} (-1)^{k-1} Ei(-2k) \\
&\quad + \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{2l} \ln\left(\frac{2l+1}{2l}\right) + \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{2l-1} \ln\left(\frac{2l}{2l-1}\right) \\
&= \gamma + \ln(2) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k Ei(-2k) + \sum_{k=1}^{\infty} \ln\left(\frac{2k-1}{2k} \frac{2k+1}{2k}\right).
\end{aligned} \tag{B.6}$$

Se observa además que segunda suma es igual a

$$\ln\left(\prod_{k=1}^{\infty} \frac{2k-1}{2k} \frac{2k+1}{2k}\right). \tag{B.7}$$

El argumento del logaritmo en (B.7) se conoce como el producto de Wallis, y su valor es igual a  $2/\pi$ . Del mismo modo, se puede ver que

$$I_2 = - \int_{-\infty}^{-1} \frac{2e^{2x}}{x(1+e^{2x})} dx = -2 \int_{-\infty}^{-1} \frac{e^{2x}}{x} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k e^{2kx} = 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k Ei(-2k), \tag{B.8}$$

por lo que reinsertando (B.6) y (B.8) en (B.3) obtenemos para  $z \gg 1$

$$\int_0^z \frac{\tanh(x)}{x} dx \approx \gamma + \ln(2) + \ln\left(\frac{2}{\pi}\right) + \ln(z) = \ln\left(\frac{4e^\gamma}{\pi} z\right). \tag{B.9}$$

## Apéndice C

### Conmutador de $\hat{\psi}_\downarrow(\vec{r})$ y $\hat{H}_{MF}$

En este apéndice se desarrollan las relaciones de conmutación necesarias para derivar las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes. Dado que

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{h}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}), \quad (\text{C.1})$$

donde

$$\hat{h}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \nabla + \frac{ie}{\hbar} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 - e\phi(\vec{r}), \quad (\text{C.2})$$

así, usando la relación,

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C} - \hat{B}\{\hat{A}, \hat{C}\}, \quad (\text{C.3})$$

se tiene

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \hat{H}_0] &= \sum_{\sigma} \int d^3\vec{r}' \underbrace{\{\hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}')\}}_{=\delta(\vec{r}-\vec{r}')\delta_{\uparrow,\sigma}} \hat{h}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}') \\ &\quad - \sum_{\sigma} \int d^3\vec{r}' \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}') \hat{h}(\vec{r}') \underbrace{\{\hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}')\}}_{=0} = \hat{h}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Así mismo

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \hat{H}_{int}^{MF}] &= \int d^3\vec{r}' \Delta(\vec{r}') \left[ \hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}') \right] + \int d^3\vec{r}' \Delta^*(\vec{r}') \left[ \hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \hat{\psi}_{\downarrow}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}') \right] \\ &= \int d^3\vec{r}' \Delta(\vec{r}') \left( \underbrace{\{\hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}')\}}_{=\delta(\vec{r}-\vec{r}')} \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}') - \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}') \underbrace{\{\hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}')\}}_{=0} \right) \\ &\quad + \int d^3\vec{r}' \Delta^*(\vec{r}') \left( \underbrace{\{\hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \hat{\psi}_{\downarrow}(\vec{r}')\}}_{=0} \hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}') - \hat{\psi}_{\downarrow}(\vec{r}') \underbrace{\{\hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}')\}}_{=0} \right) \\ &= \Delta(\vec{r}) \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Por lo tanto

$$[\hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}), \hat{H}_{MF}] = \hat{h}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}(\vec{r}) + \Delta(\vec{r}) \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}). \quad (\text{C.6})$$

# Apéndice D

## Promedios térmicos de cuasipartículas

En este apéndice se calculan los promedios térmicos de los productos de operadores fermiónicos  $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j, \hat{c}_i \hat{c}_j, \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger$ , respecto al hamiltoniano diagonal

$$\hat{H} = E_0 + \sum_i E_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i. \quad (\text{D.1})$$

Sea  $\{|i\rangle : i = 1, 2, \dots\}$  un conjunto completo de estados para un solo fermión. El ket que contiene  $n_i = 0, 1$  fermiones en el  $i$ -ésimo estado se escribe como

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = (\hat{c}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{c}_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle, \quad (\text{D.2})$$

donde  $|0\rangle$  es el estado vacío. De las relaciones de anticonmutación de Fermi, sabemos que si  $i \neq j$  entonces

$$\hat{c}_i (\hat{c}_j^\dagger)^{n_j} = (-1)^{n_j} (\hat{c}_j^\dagger)^{n_j} \hat{c}_i. \quad (\text{D.3})$$

Podemos notar que cuando el operador de aniquilación  $\hat{c}_i$  actúa sobre un vector de estado con cero partículas en el  $i$ -ésimo estado, entonces

$$\begin{aligned} \hat{c}_i |n_1, n_2, \dots, n_{i-1}, 0, n_{i+1}, \dots\rangle &= \hat{c}_i (\hat{c}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{c}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{c}_{i-1}^\dagger)^{n_{i-1}} (\hat{c}_{i+1}^\dagger)^{n_{i+1}} \dots |0\rangle \\ &= (-1)^{n_1+n_2+\dots} (\hat{c}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{c}_2^\dagger)^{n_2} \dots (\hat{c}_{i-1}^\dagger)^{n_{i-1}} (\hat{c}_{i+1}^\dagger)^{n_{i+1}} \dots \hat{c}_i |0\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

donde en el último paso se usó que cualquier operador de aniquilación actuando sobre el ket vacío es cero. Lo anterior nos permite establecer que

$$\begin{aligned} \hat{c}_i |n_1, \dots, n_{i-1}, 1, n_{i+1}, \dots\rangle &= \hat{c}_i (\hat{c}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{c}_{i-1}^\dagger)^{n_{i-1}} \hat{c}_i^\dagger (\hat{c}_{i+1}^\dagger)^{n_{i+1}} \dots |0\rangle \\ &= (-1)^{n_1+\dots+n_{i-1}} (\hat{c}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{c}_{i-1}^\dagger)^{n_{i-1}} (\hat{c}_i^\dagger)^{n_i} \hat{c}_i (\hat{c}_{i+1}^\dagger)^{n_{i+1}} \dots |0\rangle \\ &= (-1)^{n_1+\dots+n_{i-1}} (\hat{c}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{c}_{i-1}^\dagger)^{n_{i-1}} (1 - \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i) (\hat{c}_{i+1}^\dagger)^{n_{i+1}} \dots |0\rangle \\ &= (-1)^{n_1+\dots+n_{i-1}} (\hat{c}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{c}_{i-1}^\dagger)^{n_{i-1}} (\hat{c}_{i+1}^\dagger)^{n_{i+1}} \dots |0\rangle \\ &\quad - (-1)^{n_1+\dots+n_{i-1}+n_{i+1}+\dots} (\hat{c}_1^\dagger)^{n_1} \dots (\hat{c}_{i-1}^\dagger)^{n_{i-1}} \hat{c}_i^\dagger (\hat{c}_{i+1}^\dagger)^{n_{i+1}} \dots \hat{c}_i |0\rangle \\ &= (-1)^{n_1+\dots+n_{i-1}} |n_1, \dots, n_{i-1}, 0, n_{i+1}, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Podemos juntar (D.4) y (D.5) en una sola ecuación como sigue

$$\hat{c}_i |n_1, \dots, n_{i-1}, n_i, n_{i+1}, \dots\rangle = \delta_{n_i,1} (-1)^{n_1+\dots+n_{i-1}} |n_1, \dots, n_{i-1}, 0, n_{i+1}, \dots\rangle. \quad (\text{D.6})$$

Supongamos ahora que deseamos encontrar el valor esperado

$$\langle n_1, \dots | \hat{c}_i \hat{c}_j | n_1, \dots \rangle, \quad (\text{D.7})$$

con  $i \neq j$  (el caso  $i = j$  es trivial ya que  $(\hat{c}_i)^2 = 0$  por las reglas de anticonmutación fermionicas), también supongamos sin pérdida de generalidad que  $i < j$ . Empleando (D.6) y la propiedad de ortonormalidad obtenemos

$$\begin{aligned} &\langle n_1, \dots | \hat{c}_i \hat{c}_j | n_1, \dots \rangle \\ &= (-1)^{n_1+\dots+n_{j-1}} \delta_{n_j,1} \langle n_1, \dots | \hat{c}_i | n_1, \dots, n_{j-1}, 0, \dots \rangle \\ &= (-1)^{n_i+\dots+n_{j-1}} \delta_{n_i,1} \delta_{n_j,1} \langle n_1, \dots, n_{i-1}, n_i, \dots, n_{j-1}, n_j, \dots | n_1, \dots, n_{i-1}, 0, \dots, n_{j-1}, 0, \dots \rangle \\ &= (-1)^{n_i+\dots+n_{j-1}} \delta_{n_i,1} \delta_{n_j,1} \delta_{n_i,0} \delta_{n_j,0} = 0. \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Por otro lado, sabemos que

$$\langle \Psi | \hat{A}^\dagger | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle^*, \quad (\text{D.9})$$

por lo tanto

$$\langle n_1, \dots | \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i^\dagger | n_1, \dots \rangle = \langle n_1, \dots | \hat{c}_i \hat{c}_j | n_1, \dots \rangle^* = 0. \quad (\text{D.10})$$

Calculamos ahora el valor esperado de

$$\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j. \quad (\text{D.11})$$

Para el caso  $i = j$ , dicho objeto es el operador de número  $\hat{n}_i$  que al actuar sobre un ket de la forma (D.2) resulta en

$$\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle = n_i | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle, \quad (\text{D.12})$$

es decir

$$\langle n_1, \dots | \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i | n_1, \dots \rangle = n_i. \quad (\text{D.13})$$

Cuando  $i \neq j$ , es conveniente usar (D.5) para notar que

$$\langle n_1, \dots, n_{i-1}, n_i, n_{i+1}, \dots | \hat{c}_i^\dagger = \delta_{n_i,1} (-1)^{n_1 + \dots + n_{i-1}} \langle n_1, \dots, n_{i-1}, 0, n_{i+1}, \dots |, \quad (\text{D.14})$$

por ende

$$\begin{aligned} \langle n_1, \dots | \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j | n_1, \dots \rangle &= \langle n_1, \dots, n_{i-1}, n_i, n_{i+1}, \dots | \hat{c}_i^\dagger \cdot \hat{c}_j | n_1, \dots, n_{j-1}, n_j, n_{j+1}, \dots \rangle \\ &= (-1)^{n_1 + \dots + n_{j-1}} \delta_{n_i,1} \delta_{n_j,1} \langle n_1, \dots, n_{i-1}, 0, \dots, n_{j-1}, n_j, \dots | n_1, \dots, n_{i-1}, n_i, \dots, n_{j-1}, 0, \dots \rangle \\ &= (-1)^{n_1 + \dots + n_{j-1}} \delta_{n_i,1} \delta_{n_j,1} \delta_{n_i,0} \delta_{n_j,0} = 0. \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

Así, (D.13) y (D.15) pueden juntarse en una sola ecuación como

$$\langle n_1, \dots | \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j | n_1, \dots \rangle = n_i \delta_{ij}. \quad (\text{D.16})$$

Finalmente, usando la relación de anticonmutación de Fermi, se tiene

$$\langle n_1, \dots | \hat{c}_j \hat{c}_i^\dagger | n_1, \dots \rangle = \langle n_1, \dots | (\delta_{ij} - \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i) | n_1, \dots \rangle = (1 - n_i) \delta_{ij}. \quad (\text{D.17})$$

Los valores esperados obtenidos anteriormente nos permiten calcular los promedios térmicos cuando el hamiltoniano tiene la forma (D.1). Primero, observamos que

$$\hat{H} | n_1, \dots \rangle = \left( E_0 + \sum_i E_i n_i \right) | n_1, \dots \rangle, \quad (\text{D.18})$$

entonces

$$\exp(-\beta \hat{H}) | n_1, \dots \rangle = \exp\left(-\beta \left( E_0 + \sum_i E_i n_i \right)\right) | n_1, \dots \rangle, \quad (\text{D.19})$$

con  $\beta = 1/k_B T$ . Recordando que el promedio térmico de un operador es

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \frac{\text{Tr}\{\hat{A} e^{-\beta \hat{H}}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta \hat{H}}\}} \\ &= \frac{1}{\text{Tr}\{e^{-\beta \hat{H}}\}} \sum_{n_1, n_2, \dots = 0,1} \exp\left(-\beta \left( E_0 + \sum_i E_i n_i \right)\right) \langle n_1, n_2, \dots | \hat{A} | n_1, n_2, \dots \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.20})$$

También notamos que

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{e^{-\beta \hat{H}}\} &= \sum_{n_1, n_2, \dots = 0,1} \exp\left(-\beta \left( E_0 + \sum_i E_i n_i \right)\right) \\ &= e^{-\beta E_0} \sum_{n_1, n_2, \dots = 0,1} \prod_i e^{-\beta E_i n_i} = e^{-\beta E_0} \prod_i \sum_{n_i = 0,1} e^{-\beta E_i n_i} \\ &= e^{-\beta E_0} \prod_i (1 + e^{-\beta E_i n_i}). \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

Sustituyendo (D.8) y (D.10) en (D.20) se tiene

$$\langle \hat{c}_i \hat{c}_j \rangle = \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger \rangle = 0, \quad (\text{D.22})$$

por otro lado

$$\begin{aligned} \langle \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \rangle &= \frac{1}{\text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\}} \sum_{n_1, n_2, \dots=0,1} \exp\left(-\beta\left(E_0 + \sum_k E_k n_k\right)\right) \langle n_1, n_2, \dots | \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j | n_1, n_2, \dots \rangle \\ &= \frac{1}{\text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\}} \sum_{n_1, n_2, \dots=0,1} \exp\left(-\beta\left(E_0 + \sum_k E_k n_k\right)\right) n_i \delta_{ij} \\ &= \frac{1}{\text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\}} \delta_{ij} e^{-\beta E_0} \sum_{n_i} (n_i e^{-\beta E_i n_i}) \prod_{k \neq i} \sum_{n_k} e^{-\beta E_k n_k} \\ &= \delta_{ij} \frac{e^{-\beta E_0} \sum_{n_i} (n_i e^{-\beta E_i n_i}) \prod_{k \neq i} (1 + e^{-\beta E_k n_k})}{e^{-\beta E_0} \prod_k (1 + e^{-\beta E_k n_k})} \\ &= \delta_{ij} \frac{e^{-\beta E_i}}{1 + e^{-\beta E_i}} = \delta_{ij} \frac{1}{1 + e^{\beta E_i}}. \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

Finalmente, usando las relaciones de anticonmutación para operadores fermiónicos, se observa que

$$\langle \hat{c}_i \hat{c}_j^\dagger \rangle = \langle \delta_{ij} - \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i \rangle = \delta_{ij} - \langle \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i \rangle = \delta_{ij} \frac{e^{\beta E_j}}{1 + e^{\beta E_j}}. \quad (\text{D.24})$$

# Bibliografía

[Onnes, 1911] H. Kamerlingh Onnes, “On The Sudden Change in the Rate at which the Resistance of Mercury Disappears”, *Proc. K. Ned. Akad. Wet.* **14**, 818 (1911).

[Meissner, 1933] W. Meissner y R Ochsenfeld, “Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit”, *Naturwissenschaften* **21**, 787 (1933).

[Abrikosov, 1957] A. A. Abrikosov, “On the Magnetic Properties of Superconductors”, *J.E.T.P. USSR* **32**, 1442 (1952).

[Bednorz, 1986] Bednorz, J.G., Müller, K.A. “Possible High  $T_c$  Superconductivity in the Ba-La-Cu-O System”. *Z. Physik B - Condensed Matter* **64**, 189–193 (1986).

[Tinkham, 1996] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, 2nd edition (Mc Graw-Hill, New York, 1996) p. 2, 118

[Mangin, 2017] Philippe Mangin y Rémi Kahn (2017). *Superconductivity An Introduction*, 1st edition (Springer, Switzerland, 2017) p. 131

[Landau, 1937] L. D. Landau. “On the Theory of Phase Transitions” *J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.)* **7**, 19 (1937)

[Ginzburg, 1950] V. L. Ginzburg y L. D. Landau. “On the Theory of Superconductivity” *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20**, 1064 (1950)

[Gennes, 1999] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Westview Press, New York, 1999) p. 46, 52

[Cribier, 1964] D. Cribier, B. Jacrot, L. M. Rao, y B. Farnoux, *Phys. Lett. (Netherlands)* **9**, 106 (1964); “in Progress in Low Temperature Physics”, C.J. Gorter, ed., North-Holland, Amsterdam (1967), Vol. V, p. 161.

[Fischer, 2007] O. Fischer, M. Kugler, I. Maggio-Aprile, C. Berthod, y C. Renner, “Scanning tunneling spectroscopy of high-temperature superconductors”. *Rev. Mod. Phys.* **79**, 353 (2007)

[Kittel, 1996] Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 7th edition. (John Wiley Sons, New York, 1996). p. 216

[7] A.A. Abrikosov, *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.* **32**, 1442 (1957) [*Sov. Phys –JETP* **5**, 1174 (1957)]

[London, 1950] F. London, *Superfluids*, Vol I (John Wiley and Sons, Inc., New York, 1950) p. 152

[Deaver, 1961] B. S. Deaver, Jr., y W. M. Fairbank. “Experimental Evidence for Quantized Flux in Superconducting Cylinders” *Phys. Rev. Lett.* **7**, 43 (1961)

[Frohlich, 1950] H. Frohlich, “Theory of the superconducting state. I. The ground state at absolute zero temperature”. *Phys. Rev.* **79**, 845 (1950)

[Fujita, 2002] S. Fujita y S. Godoy, *Quantum Statistical Theory of Superconductivity* (Kluwer Academic Publishers, New York, 2002) p. 138

[Griffiths, 2005] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd Edition (Pearson Prentice Hall, New Jersey, 2005) p. 249

[11] <https://arxiv.org/pdf/1012.4576.pdf> (pag 221)

[Cooper 1956] L. N. Cooper, “Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas”, *Phys. Rev.* **104**, 1189-1190 (1956).

[Bardeen 1957] J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer, “Microscopic Theory of Superconductivity”, *Phys. Rev.* **106**, 162 (1957).

[A.B.Pippard] (1953) *Proc. Roy. Soc. A* 216, 597

[Zhu 2016] Jian-Xin Zhu, *Bogoliubov-de Gennes Methods and its applications* (Los Alamos, New Mexico, 2016). p.37

[Aschcroft, 1976] N. W. Aschcroft y N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Harcourt. Inc. Orlando, 1976) p. 461

[Ketterson, 1999] J. B. Ketterson y S. N. Song, *Superconductivity* (Cambridge University Press, United Kindom, 1999) p. 215

[Corak, 1956] W. S. Corak, B. B. Goodman, C. B. Satterthwaite, y A Wexler, *Phys. Rev.* **96**, 1442 (1954): **102**. 656 (1956)

[Klein, 2006] T. Klein, L. Lyard, J. Marcus, Z. Holanová y C. Marcenat, “Magnetic field dependence of the coherence length and penetration depth of MgB<sub>2</sub> single crystals”, *Phys. Rev. B.* **73**, 184513 (2006)

[Peierls, 1933] R.E. Peierls, “Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen”, *Z. Phys.* **80**, 763 (1933)