

25
2 ej



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

CALORES ESPECIFICOS EN UN MODELO
ESTADISTICO SIMPLE DE LA
SUPERCONDUCTIVIDAD

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

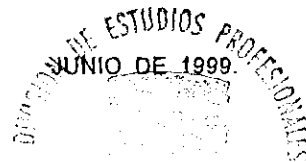
F I S I C O

P R E S E N T A :

JUAN JOSE VALENCIA ACEVEDO

DIRECTORES DE TESIS: DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA

DR. MIGUEL ANGEL SOLIS ATALA



FACULTAD DE CIENCIAS
SECRETARÍA

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



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.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

MAT. MARGARITA ELVIRA CHÁVEZ CANO
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: Calores específicos en un modelo estadístico simple de la superconductividad.

realizado por JUAN JOSE VALENCIA ACEVEDO

con número de cuenta 9251811-3 , pasante de la carrera de FISICA

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis Propietario DR. MIGUEL ANGEL SOLIS ATALA

Propietario DR. MANUEL DE LEANO DE LA GARZA

Propietario DR. GUILLERMO RAMIREZ SANTIAGO

Suplente DR. ARIEL ALBERTO VALLADARES CLEMENTE

Suplente DR. ORACIO NAVARRO CHAVEZ



Patricia Goldstein Menache
Consejo Departamental de Física FACULTAD DE CIENCIAS
DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE DEPARTAMENTO DE FISICA

Agradecimientos

Quiero aprovechar la oportunidad para dar las gracias muy especiales a los Drs. Miguel Ángel Solís Atala y Manuel de Llano de la Garza, por la confianza y dirección tan profesional que los distingue, la dedicación, motivación y su disposición académica.

Al Jurado integrado, además de mis Directores de tesis, por los Drs. Guillermo Ramírez Santiago, Ariel Alberto Valladares Clemente y Oracio Navarro Chávez, les agradezco sus oportunos comentarios que han enriquecido la presentación final de esta tesis.

Al Instituto de Física e Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM el haberme aceptado como estudiante Asociado y así mismo disponer de sus instalaciones y servicios durante la elaboración de esta tesis. El poder concluir esta tesis fue gracias al apoyo de quienes allí laboran. Al personal de cómputo del IFUNAM por sus asesorías en cuanto a la edición e impresión de esta tesis en LATEX.

Por último, quiero agradecer a Fundación UNAM, el haberme otorgado la beca de tesis de licenciatura.

RESUMEN

Se calcula la discontinuidad en temperatura del calor específico que los materiales superconductores exhiben experimentalmente, modelándose la superconductividad como una condensación de Bose-Einstein (CBE) de los electrones apareados (pares de Cooper) con una relación energía-momento lineal en el centro de masa. Primero resolvemos el problema más general de un gas de bosones en d dimensiones y con una relación de dispersión generalizada, es decir, la energía de los bosones es proporcional al momento elevado a una potencia $s > 0$. Posteriormente se agrega a esta relación de dispersión una posible brecha de energía. Primero se deduce la temperatura de transición T_c , enseguida la energía interna y por último se obtiene el calor específico. La discontinuidad del calor específico aparece si y sólo si $d/s > 2$. Para una relación de dispersión lineal, $s = 1$, se compara el salto ΔC_V en el calor específico con datos experimentales y con valores calculados de la teoría BCS.

Al hacer la comparación teoría-experimento de ΔC_V obtenido de la teoría CBE se obtiene una mejor aproximación a los resultados experimentales de materiales en 3D. Para ciertos materiales convencionales tridimensionales el error porcentual promedio es de 5.41 %, mientras que con la teoría BCS es 5.43 %.

Sin embargo, el agregar una brecha a la relación energía-momento de los pares de Cooper ocasiona que ΔC_V calculado con la teoría CBE se aleje aún más de los resultados experimentales, de modo que el promedio de error porcentual que era 5.41 % crece a 12.11 %, y otro que era 37.9 % crece a 43.3 %.

Por último, en el Apéndice B se demuestra que la condensación de Bose-Einstein también ocurre en el espacio de coordenadas.

ÍNDICE

Agradecimientos	i
Resumen	ii
Lista de tablas	iv
Lista de figuras	v
1 Introducción	1
2 Teoría BCS para la superconductividad	5
2.1 Introducción	5
2.2 Temperatura crítica T_c	8
2.3 Discontinuidad del calor específico en $T = T_c$	10
3 Superconductividad como una Condensación Bose-Einstein	15
3.1 Introducción	15
3.2 Temperatura de transición al estado condensado	17
3.3 Energía interna	21
3.4 Calor específico	22
3.5 Relación de dispersión tomando en cuenta el “gap” de excitación	25
3.6 Calor específico para la relación de dispersión con “gap”	30
4 Calores específicos	35
5 Conclusiones	46
Apéndice A	
T_c según Gould <i>et al.</i> [12]	49
Apéndice B	
Condensación de Bose-Einstein en el espacio real	52
Referencias	59

Lista de tablas

Tabla 1. Casos en los que $\Delta C_V(T_c)$ es distinto o igual a cero.

Tabla 2. Valores teóricos y experimentales de $\Delta C/C_s$ para materiales en 3D.

Tabla 3. Valores teóricos (incluyendo los de la teoría Eliashberg [6]) y experimentales de $\Delta C/C_s$ para materiales en 3D.

Tabla 4. Comparación teoría-experimento de $\Delta C/C_s$ para materiales en 2D.

Lista de figuras

- Fig. 2.1.** Distribución de la energía del electrón en un superconductor. La densidad de estados y la probabilidad de ocupación se muestran para energías cerca del nivel de Fermi a tres temperaturas: (a) justamente por arriba de la temperatura crítica (fase normal), (b) inmediatamente por abajo de la temperatura crítica, y (c) a cero grados kelvin (tomada de [4] pág. 418).
- Fig. 2.2.** Agrupamiento de los niveles de energía de una partícula en celdas (tomada de [10] pág. 128).
- Fig. 3.1.** Energía interna (en unidades de $Nk_B T$) como una función de la temperatura (en unidades de T_c) para $(d, s) = (3, 2)$, $(2, 1)$ y $(3, 1)$ (tomada de [11]).
- Fig. 3.2.** Variación del “gap” bosónico de energía, $\varepsilon_g(T)$, como función de la temperatura, el cual da la mínima energía de excitación de los bosones. Esta figura ilustra que $\varepsilon_g(T)$ es cero cuando $T \geq T_c$ (tomada de [5] pág. 211).
- Fig. 3.3.** El calor específico del ^4He líquido (tomada de la pág. 165 de [10]).
- Fig. 4.1.** El calor específico C_V para bosones con una relación de dispersión lineal en un sistema de dos dimensiones. Cuando $T < T_c$ es proporcional a T^2 , llega a su valor máximo, $4.38 R$, en $T = T_c$ y después decrece a $2R$ en el límite de altas temperaturas. R es la constante del gas ideal (tomada de la pág. 186 de Ref. [5]).
- Fig. 4.2.** C_V/T vs. T para el $\text{TlCaBaCu}_2\text{O}_{5.5}$ cerca de T_c a $H = 0$ y 7 teslas (ver [17]).
- Fig. 4.3.** C_V/T vs. T para el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ para el cual $T_c = 90.83 \text{ K}$ (Fujita, comunicación personal)
- Fig. A.1.** Tres isotermas de van der Waals para un fluido clásico.
- Fig. A.2.** Tres isotermas en el plano $P - V$ para un gas de bosones.

Capítulo 1

Introducción

La superconductividad es una propiedad de la materia que fue descubierta a principios de siglo para un número muy limitado de sustancias y ocurre a muy bajas temperaturas. En los últimos diez años se ha extendido a nuevos materiales compuestos (cerámicas) a “altas temperaturas”, abriendo una perspectiva de aplicación casi ilimitada para la creación y uso de nuevos materiales y sus aplicaciones tecnológicas, lo que podría augurar una verdadera revolución rivalizando con la invención del transistor que impulsó la sociedad industrial hacia la sociedad informática en la que vivimos.

Por otra parte, la observación experimental en 1995 de la condensación de Bose-Einstein (CBE) en nubes frías de unos cuantos átomos es quizás el experimento más impactante realizado recientemente que ha sacudido el ambiente profesional de los físicos, pues representa la evidencia real de lo que durante 70 años se consideró como meras interpretaciones académicas de modelos teóricos de átomos y de partículas.

¿Hasta qué punto ambos fenómenos están relacionados? Esta ha sido una cuestión debatida planteada más como pregunta sin respuesta o afirmación no aprobada que como explicación lógica y coherente en el marco de una teoría aceptada. En esta tesis relacionamos la teoría de la superconductividad y la condensación BE mediante una nueva interpretación de los pares de Cooper como bosones con una relación de dispersión lineal.

No es nueva la sospecha de que la superconductividad consiste de una fase termodinámica condensada del tipo Bose-Einstein en tres dimensiones. Es decir, que el estado de resistencia eléctrica cero llamado superconductor pueda explicarse como un sistema cuántico de muchos bosones en el que una fracción apreciable de ellos se encuentra en el estado de energía más baja del sistema de N -cuerpos. Cuando dicho sistema se enfría por debajo de una temperatura

finita de transición T_c , puede ser descrito en una primera aproximación como un gas de bosones interaccionando débilmente. Después de varios años de estancamiento de los superconductores conocidos como convencionales con temperaturas de transición menor a 25 grados kelvin, en 1986 se dio un notable avance con el descubrimiento de los superconductores de óxido de cobre con alta temperatura de transición. Hasta el momento se ha llegado a la temperatura de transición record de 164 grados kelvin en un cuprato de mercurio a una presión de 300,000 atmósferas [1]. Sin embargo, esta temperatura está todavía muy por debajo de la temperatura ambiente, 300 grados kelvin, por lo que sigue siendo un costo económico muy grande el llevar a estos materiales a su fase superconductor. El que todavía no hayamos alcanzado experimentalmente una temperatura crítica de transición cerca de la temperatura ambiente es en parte por que no existe hasta ahora una teoría microscópica satisfactoria que explique el fenómeno de la superconductividad, y más aún, capaz de predecir nuevos materiales con T_c 's verdaderamente altas.

El fenómeno CBE se propuso teóricamente en 1925, pero fue observado experimentalmente de forma convincente hasta 1995. Primero en una nube de unos 2,000 átomos de rubidio, luego en nubes de unos 5,000 átomos de litio y más recientemente de unos 500,000 átomos de sodio. Teóricamente, se sabe que la condensación de Bose-Einstein para un gas de bosones con masa puede ocurrir sólo en sistemas con dimensión espacial $d > 2$. Esto, por supuesto, excluye a ciertos superconductores orgánicos descubiertos a fines de los años setentas y que pueden considerarse con estructura casi unidimensional [2]. Sin embargo, como veremos en el Capítulo 3, considerando los pares de Cooper como bosones con una relación de dispersión lineal podemos interpretar a la superconductividad en estos compuestos orgánicos como una condensación de BE. Allí demostraremos que puede haber condensación de Bose-Einstein cuando $d > s$, con d la dimensión del espacio y s la potencia con la que la energía depende del momento lineal del par, es decir, el grado de la relación de dispersión.

La supuesta relación de la CBE con la superconductividad se remonta a los años cuarenta

en los trabajos del químico Ogg, a los años cincuenta con Ginzburg, [1] y posteriormente a la obra detallada de los australianos Schafroth, Blatt y colaboradores [3]. Unos años después, en 1957, apareció la elegante teoría de los estadounidenses Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) [4], que los convirtió en ganadores del Premio Nobel de Física en 1972.

El ingrediente básico de la teoría BCS de la superconductividad es la formación de pares de electrones dentro del mar de Fermi debido a la interacción electrón-fonón en un metal, lo que da lugar a la aparición de una nueva fase termodinámica que es precisamente la superconductividad. En contraste, la condensación de Bose-Einstein de un gas de partículas bosónicas sin interacción constituye una nueva fase de la materia con propiedades de coherencia muy especial. En la teoría BCS se consideran sólo pares de electrones (pares de Cooper) con momento lineal total igual a cero. Son estos pares de Cooper, los que se pueden considerar como partículas cuasi-bosónicas, que dan lugar a una CBE cuando el número de ellos en un solo estado se vuelve apreciable macroscópicamente. Esto ocurre al enfriar por debajo de una cierta temperatura de transición. Al considerar además pares con momentos lineales del centro de masa diferentes de cero obtenemos valores de las temperaturas críticas mucho más altas que las correspondientes temperaturas críticas obtenidas con la teoría BCS en dos o tres dimensiones. Lo anterior ocurre aun en el límite cuando la interacción atractiva electrón-fonón es débil donde los pares de electrones formados se comportan como cuasi-bosones. Estos se encuentran mezclados con los restantes electrones no apareados formando una mezcla ideal de bosones y fermiones dando lugar a una condensación a la Bose-Einstein. En el límite de momentos pequeños del par, la relación de dispersión, es decir, la relación energía-momento, no es cuadrática sino lineal.

Se pretende desarrollar un modelo estadístico simple para relacionar dos teorías microscópicas mecánico-cuánticas de sistemas multielectrónicos fuertemente correlacionados conectadas con el fenómeno de la superconductividad, a saber, la teoría BCS por un lado, y la teoría de CBE por el otro. Además, se pretende extender un modelo estadístico simple al caso más general

de: a) pares rompibles, ya que al aumentar la temperatura aumenta el término cinético de la relación de dispersión y éste puede compensar la energía de ligadura del par; y b) a mezclas de los cuasi-bosones con los fermiones, estos últimos provienen de los pares que se han roto. Esto se planteará usando la interacción del modelo BCS junto con la generalización de Fujita y colaboradores [5] que reconoce la importancia de los pares de Cooper con momento lineal total distinto de cero.

Por otro lado, los resultados experimentales para el calor específico en materiales que pueden tener una fase superconductoras muestran una discontinuidad al cruzar por la temperatura de transición. Si queremos una teoría satisfactoria para explicar el fenómeno de la superconductividad debemos deducir teóricamente dicha discontinuidad.

En esta tesis, se calcula el calor específico, C_V , y la discontinuidad o salto, ΔC_V , al cruzar por la temperatura de transición, T_c . Para ello se usan las teorías CBE y la de BCS. En el Capítulo 2 se da un esbozo de la deducción de C_V y ΔC_V por medio de la teoría BCS. En el Capítulo 3 se calcula dicha discontinuidad generalizando la teoría CBE para cualquier dimensión espacial $d > 0$ junto con una relación de dispersión de los bosones de orden $s > 0$. Después de obtener las expresiones teóricas para dicha discontinuidad, en el Capítulo 4 se comparan con los resultados experimentales. Así podemos saber cual de estas dos formulaciones, que producen una discontinuidad en C_V , es más consistente con los resultados experimentales. Para lograr este objetivo se recopilaron valores experimentales de materiales superconductores en 2D y 3D y se comparan las diferencias porcentuales entre los resultados teóricos y los datos experimentales. También se incluyen resultados reportados para algunos materiales en 3D, obtenidos con la teoría BCS-Eliashberg [6]. En el Capítulo 5 se presentan las conclusiones.

Capítulo 2

Teoría BCS para la superconductividad

2.1 Introducción.

La teoría propuesta por John Bardeen, Leon Cooper y J. Robert Schrieffer en 1957 (ver Ref. [4]) nos proporciona una base teórica para el entendimiento cuantitativo del fenómeno de la superconductividad. El ingrediente central de esta teoría es la formación de pares de electrones conocidos como pares de Cooper. Este apareamiento puede ser pensado de la siguiente manera: un electrón pasa a través de la red de iones positivos los cuales son atraídos por dicho electrón, causando una distorsión respecto a su posición original. Un segundo electrón que siente la distorsión es atraído por los iones desplazados. Así, tenemos una atracción neta entre los dos electrones después de absorber o emitir un fonón cuya energía máxima es la energía de Debye, $\hbar\omega_D$. El modelo de interacción simple BCS implica que habrá interacción atractiva si el electrón: a) tiene una energía mayor que la energía máxima $E_F \equiv \hbar^2 k_F^2 / 2m^*$ (energía de Fermi) de los $N - 2$ electrones de fondo, y b) emite o absorbe un fonón de energía menor o igual a $\hbar\omega_D$ (ver Ref. [4]).

Esta interacción simula la interacción neta atractiva que resulta de la repulsión coulombiana electrón-electrón más la atracción electrón-fonón propuesta por Fröhlich en 1950. La atracción pura electrón-fonón es el mecanismo dinámico fundamental que explica, curiosamente, tanto la resistencia eléctrica finita en el caso de un conductor normal como la resistencia nula en un superconductor. Esta dinámica es análoga a la de la interacción atractiva entre dos nucleones que intercambian piones [1].

Los electrones que forman un par de Cooper tienen su momento y su espín antiparalelos. El espín total del par es entero debido a que cada uno tiene espín semi entero, así pues, los pares de Cooper son parecidos a los bosones.

La distancia típica entre los electrones del par es del orden de mil nanómetros, ver Ref. [4], así que la atracción entre estos es extremadamente débil. Debido a esto la transición a la fase superconductor sólo ocurre cuando las fluctuaciones térmicas son pequeñas. La transición ocurre debido a que cerca de la energía de Fermi los electrones tienen una atracción neta.

Examinemos un poco la distribución de la energía de los electrones en un superconductor. La Fig. 2.1 muestra la distribución de la energía de los electrones cerca de la energía de Fermi en un superconductor a tres temperaturas. A $T = 0$, a una temperatura ligeramente arriba de la temperatura de transición, T_c , cuando el material está en su fase normal, y a una temperatura un poco abajo de la temperatura de transición. Aquí un pequeño “gap” de energía, $\Delta(T)$, se empieza a desarrollar, el cual es una franja de estados no permitidos para los electrones. El “gap” es causado por la energía de amarre utilizada para formar los pares de Cooper. Como ya se mencionó anteriormente la formación de pares de Cooper se inhibe con la excitación térmica de los electrones. Así, cuando la temperatura baja, el número de electrones que puede cruzar el “gap” es significativamente pequeño por lo que se forma un gran número de pares y en consecuencia el “gap” se ensancha. El orden de magnitud del “gap” a cero kelvin es 10^{-4} veces la energía de Fermi, E_F .

$$\Delta(0) \approx 10^{-4} E_F. \quad (1)$$

Los estados que ocupaban las energías donde aparece el “gap” son removidos lejos de la energía de Fermi y dan lugar a un pico en la densidad de estados inmediatamente arriba y abajo del “gap”. El número total de estados no cambia pero si su distribución. A la temperatura de cero kelvin todos los estados que se encuentran por debajo del “gap” están ocupados mientras que por arriba de éste todos los estados están vacíos. La energía total en el estado superconductor es más baja que en el estado normal. Los pares de Cooper son incapaces de esparcirse a estados de energía más altos debido a la presencia del “gap”.

La teoría BCS predice el tamaño del “gap” de energía como una función de la temperatura.

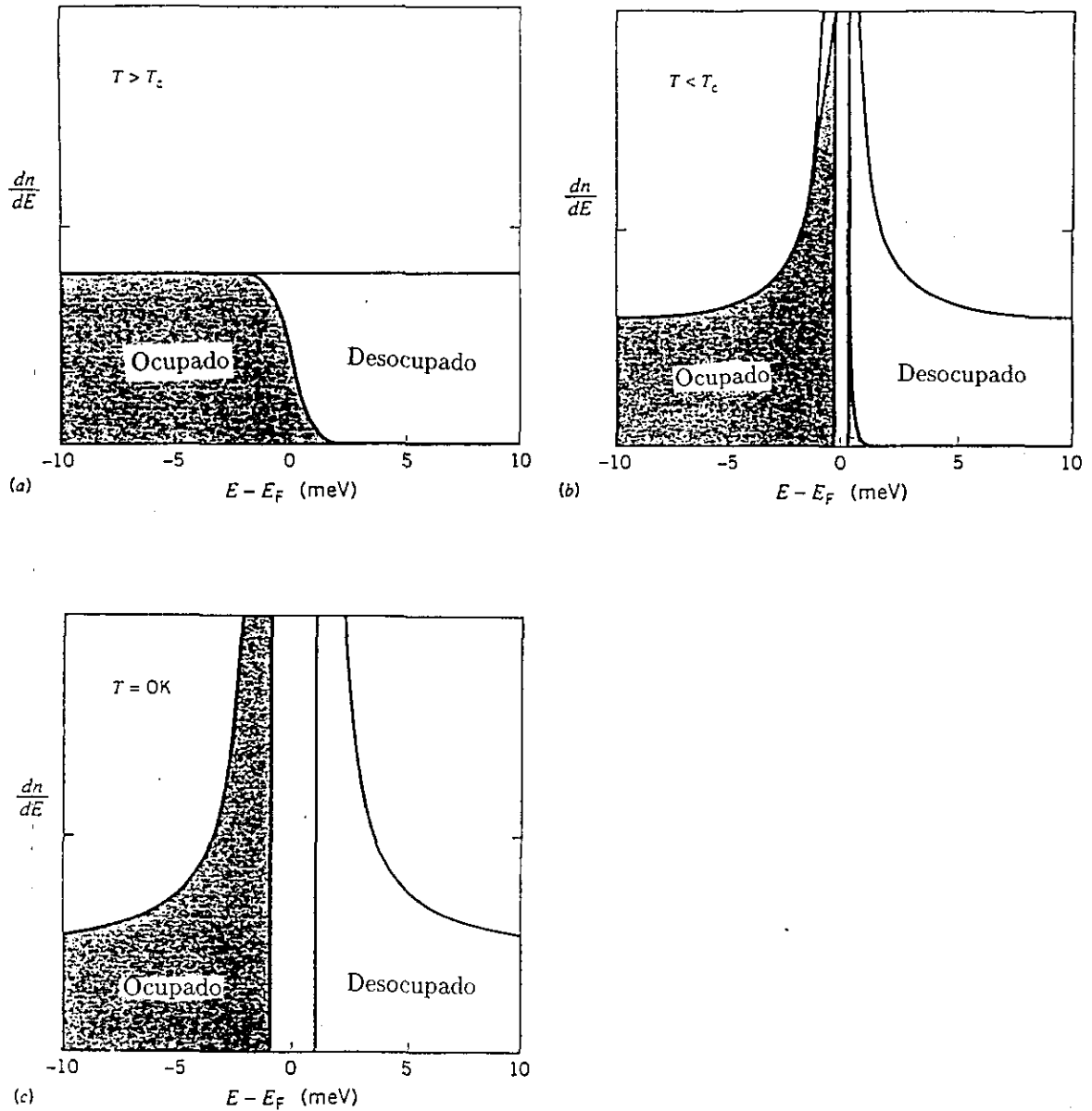


Figura 2.1. Distribución de la energía del electrón en un superconductor. La densidad de estados y la probabilidad de ocupación se muestran para energías cerca del nivel de Fermi a tres temperaturas: (a) justamente por arriba de la temperatura crítica (fase normal), (b) inmediatamente por abajo de la temperatura crítica, y (c) a cero grados kelvin (tomada de [4] pág. 418).

En particular, demuestra que

$$\Delta(0) = 1.76 k_B T_c. \quad (2)$$

Como los pares de Cooper no pueden absorber calor (ya que en BCS sólo se considera a pares cuyo momento lineal total es igual a cero ($k = 0$)). Entonces para considerar excitaciones ($k \neq 0$) se introducen cuasi-partículas fermiónicas llamadas bogolones formadas por una partícula y un hueco y cuyas energías están dadas por la energía relativa de los dos electrones que forman el par de Cooper: $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, o bien, medidas respecto de la energía de Fermi

$$\varepsilon_k = \epsilon_k - E_F.$$

Si queremos tomar $k \neq 0$, es decir, tener energías de estados excitados, la ecuación para la energía de los bogolones debe tomar en cuenta la energía necesaria para estar en el primer estado excitado, la cual es $\Delta(T)$, por lo que

$$E_k = [\varepsilon_k^2 + \Delta^2(T)]^{1/2} \quad (3)$$

es la energía de excitación de un bogolón de momento $\hbar k$. La dependencia de esta energía de excitación en la temperatura está dada por $\Delta(T)$. Estas energías son los eigenvalores del hamiltoniano de los pares de Cooper después de aplicarle una transformación que lo diagonaliza. La transformación que diagonaliza a dicho hamiltoniano fue obtenida por Bogoliubov [7] y Valatin [8], de aquí el nombre de las cuasi-partículas. Así, E_k es la energía de excitación de una cuasi-partícula de momento $\hbar k$.

2.2 Temperatura crítica T_c .

Se puede demostrar que el potencial de interacción de los pares de Cooper se puede escribir como [9]

$$\frac{1}{V} = \frac{1}{2} \sum_k \frac{\tanh(\beta E_k / 2)}{E_k}. \quad (4)$$

La temperatura crítica T_c es la temperatura a la cual $\Delta(T)$ se va a cero. En este caso E_k se vuelve $|\varepsilon_k|$, y por lo tanto el espectro de excitación del estado superconductor se vuelve el espectro de

excitación del estado normal. Para encontrar T_c basta con reemplazar E_k por $|\varepsilon_k|$ y, obviamente, T por T_c en la ecuación (4). Para esta ecuación podemos cambiar la suma por la integral para un volumen macroscópico en el cual los niveles de energía forman un cuasi-continuo de niveles. Como el potencial de interacción es distinto de cero, e igual a $-V$, sólo para las partículas que se encuentran en los estados dentro del intervalo cuyos extremos son $E_F - \hbar\omega_D$ y $E_F + \hbar\omega_D$, entonces los límites de integración de la integral que nos da a este potencial son $-\hbar\omega_D$ y $+\hbar\omega_D$ (recordemos que $|\varepsilon|$ esta tomada apartir del nivel de Fermi). Si hacemos $x = \beta|\varepsilon|/2$ la ecuación (4) evaluada en $T = T_c$, después de cambiar la suma por la integral, es

$$\frac{1}{g(E_F)V} = \frac{1}{2} \int_{-\beta_c \hbar\omega_D/2}^{\beta_c \hbar\omega_D/2} \frac{\tanh x}{x} dx,$$

como $\hbar\omega_D \ll E_F$ entonces la densidad de estados $g(\varepsilon_k)$ en el intervalo de energías de los límites de integración es aproximadamente constante e igual a $g(E_F)$ por esto puede salir de la integral. Aprovechando la simetría de $|\varepsilon_k|$ alrededor del nivel de Fermi llegamos a

$$\frac{1}{g(E_F)V} = \int_0^{\beta_c \hbar\omega_D/2} \frac{\tanh x}{x} dx. \quad (5)$$

Se puede demostrar que esta integral es aproximadamente igual a $\ln(1.13\beta_c \hbar\omega_D)$, siempre y cuando $\beta_c \hbar\omega_D/2 \gg 1$. Por último, despejando β_c llegamos a

$$\beta_c = \frac{e^{1/g(E_F)V}}{1.13\hbar\omega_D}. \quad (6)$$

Por otro lado, sabemos que cuando el producto $g(E_F)V$ es pequeño [9]

$$\Delta(0) \xrightarrow{g(E_F)V \rightarrow 0} 2\hbar\omega_D e^{-1/g(E_F)V} \quad (7)$$

Multiplicando (6) por (7) llegamos a la (2), esto es, el “gap” en $T = 0$ es comparable con $k_B T_c$. El factor numérico de 1.76 se ha comparado con muchos resultados experimentales y se encuentra en acuerdo razonable.

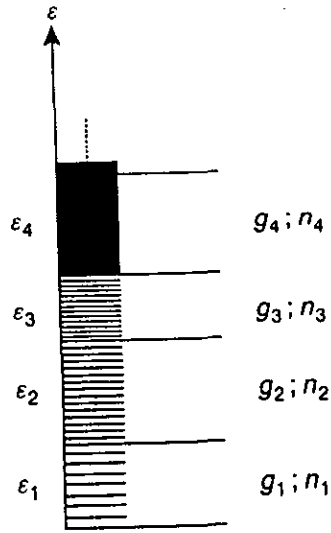


Figura 2.2. Agrupamiento de los niveles de energía de una partícula en celdas (tomada de [10] pág. 128).

2.3 Discontinuidad del calor específico en $T = T_c$.

En un sistema de volumen macroscópico V , los niveles de energía deben estar extremadamente cercanos entre sí, por lo que podemos dividir el espectro de energía en un gran número de “grupos de niveles” que podemos llamarlos celdas de energía; ver Fig. 2.2. Denotemos con ε_k el promedio de energías de un grupo de niveles, con g_k el número de niveles en la k -ésima celda y sea n_k el número de partículas en la k -ésima celda. La entropía para este sistema está dada por la ecuación (16) del Capítulo 6 de la Ref. [10] ésta es

$$\frac{S}{k_B} \approx \ln W n_k^* = \sum_k \left[n_k^* \ln \left(\frac{g_k}{n_k^*} - a \right) - \frac{g_k}{a} \ln \left(1 - a \frac{n_k^*}{g_k} \right) \right],$$

donde n_k^* son los valores más probables de los números de distribución n_k ; $a = +1$ para el caso de la estadística de Fermi-Dirac. Por esto la expresión anterior nos interesa en la forma

$$\frac{S}{k_B} = \sum_k \left[n_k^* \ln \left(\frac{2}{n_k^*} - 1 \right) - 2 \ln \left(1 - \frac{n_k^*}{2} \right) \right],$$

donde se utilizó el agrupamiento en celdas energéticas de tal manera que en la k -ésima celda sólo hay un nivel y g_k es la degeneración de espín, es decir $g_k = 2$. Así pues, $n_k^*/2$ es el número

más probable de partículas en el estado k . Por lo cual

$$n_k^*/2 \equiv f_k = (1 + e^{\beta(E_k - \mu)})^{-1} \quad (8)$$

donde μ es el potencial químico para fermiones, el cual es una función de la temperatura, f_k es la distribución de Fermi-Dirac, que no es más que el número promedio de fermiones en el estado k . Como lo que nos interesa es el comportamiento del sistema a temperaturas bajas ($\approx 100 K$) con respecto a la temperatura de Fermi ($\approx 5000 K$), el potencial químico de los fermiones es prácticamente la energía de Fermi (ver pág. 200 de [10]), la cual estamos tomando como el cero de las energías; así tenemos que $\mu \cong 0$. Escribiendo la entropía en términos de f_k tenemos

$$\frac{S}{k_B} = \sum_k \left[n_k^* \ln\left(\frac{1}{f_k} - 1\right) - 2 \ln(1 - f_k) \right]$$

o bien, después de reordenar

$$S = -2k_B \sum_k [(1 - f_k) \ln(1 - f_k) + f_k \ln f_k]. \quad (9)$$

Por otro lado, el calor específico se define como

$$C_V = T \left(\frac{dS}{dT} \right)_{V,N},$$

multiplicando y dividiendo por k_B tenemos

$$C_V = \beta^{-1} \frac{dS}{d\beta^{-1}}.$$

Utilizado la regla de la cadena podemos encontrar la derivada parcial de la entropía con respecto a β

$$\frac{\partial S}{\partial \beta} = -\beta^{-2} \frac{\partial S}{\partial \beta^{-1}}.$$

Sustituyendo este resultado en la última expresión para el calor específico llegamos a que

$$C_V = -\beta \frac{dS}{d\beta}.$$

Usando (9) para el estado superconductor, es decir, con $\Delta(T) \neq 0$ el calor específico a volumen constante tiene la forma

$$C_s = 2\beta k_B \sum_k \frac{\partial}{\partial \beta} [(1 - f_k) \ln(1 - f_k) + f_k \ln f_k],$$

donde el subíndice s nos indica que el sistema está en el estado superconductor. Realizando la derivada obtenemos

$$C_s = 2\beta k_B \sum_k \left[\frac{\partial f_k}{\partial \beta} \ln \frac{f_k}{1 - f_k} \right]. \quad (10)$$

Sustituyendo f_k por su forma dada por (8) es fácil ver que $\ln f_k/(1 - f_k) = -\beta E_k$ (ya se había mencionado que para este caso $\mu \cong 0$). Así, (10) tiene la forma

$$C_s = -2\beta^2 k_B \sum_k E_k \frac{\partial f_k}{\partial \beta}. \quad (11)$$

Utilizando la regla de la cadena podemos cambiar la parcial con respecto a β por la parcial con respecto a βE_k

$$C_s = -2\beta^2 k_B \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial \beta E_k} \left[E_k^2 + \frac{1}{2} \beta \frac{d\Delta^2}{d\beta} \right] \quad (12)$$

Como $\mu \cong 0$ es fácil ver que

$$\frac{df_k}{d\beta E_k} = \frac{1}{\beta} \frac{df_k}{dE_k}. \quad (13)$$

Con la ayuda de la Ec. (13) C_s dado por (12) se reescribe como

$$C_s = 2\beta k_B \sum_k -\frac{\partial f_k}{\partial E_k} \left[E_k^2 + \frac{1}{2} \beta \frac{\partial \Delta^2}{\partial \beta} \right], \quad (14)$$

el segundo término del segundo miembro de (14), es la contribución al calor específico debida a la variación del “gap” con la temperatura. Lo que nos interesa es ver lo que pasa cerca de T_c . Antes de esto veamos cual es el calor específico cuando $\Delta(T) = 0$, es decir, en el estado normal de un sistema de volumen macroscópico (cuando los niveles de energía los podemos tomar como un continuo). Para esto además de cambiar E_k por $|\varepsilon_k|$ en (14) debemos de cambiar la suma por la integral con la densidad de estados fermiónicos $g(|\varepsilon_k|)$

$$C_n = -2\beta k_B g(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} |\varepsilon|^2 \frac{\partial f}{\partial |\varepsilon|} d\varepsilon.$$

En realidad se está integrando sobre el pequeño rango de energías $[-\hbar\omega_D, \hbar\omega_D]$ ya que, como se ha mencionado antes, ε_k es la energía relativa, medida desde el nivel de Fermi, del par de Cooper los cuales no existen fuera de dicho rango. Como $\hbar\omega_D \ll E_F$, podemos aproximar a la densidad de estados, $g(|\varepsilon_k|)$, como la densidad de estados en el centro del intervalo $[-\hbar\omega_D, \hbar\omega_D]$, $g(E_F)$, la cual es una constante y puede escribirse fuera de la integral. Integrando por partes

$$C_n = -2\beta k_B g(E_F) \left[|\varepsilon|^2 f|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} 2|\varepsilon| f d\varepsilon \right].$$

De la Ec. (8) sabemos que al evaluar $f(|\varepsilon|)$ tanto en ∞ como en $-\infty$, el resultado es cero, por lo que la última ecuación se reduce a

$$C_n = 4\beta k_B g(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\varepsilon| d\varepsilon}{e^{\beta|\varepsilon|} + 1},$$

aprovechando la simetría de $|\varepsilon|$ y haciendo el cambio de variable $x = \beta|\varepsilon|$ tenemos

$$C_n = \frac{8k_B g(E_F)}{\beta} \int_0^{\infty} \frac{x dx}{e^x + 1}.$$

La integral vale $\pi^2/12$. Sustituyendo β por $1/k_B T$ y reordenando factores obtenemos que el calor específico en el estado normal es

$$C_n = \frac{2\pi^2}{3} g(E_F) k_B^2 T. \quad (15)$$

El segundo término de la Ec. (14) es distinto de cero cuando $T \rightarrow T_c^-$, esto es por que el “gap” cerca de T_c se comporta como [9]

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} \approx 1.74 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2} \quad \text{para } T \approx T_c. \quad (16)$$

Como (15) es continua al pasar por $T = T_c$, entonces la discontinuidad del calor específico al pasar por dicha temperatura está dada por el segundo sumando de (14) evaluado en T_c . Es decir;

$$\Delta C = (C_s - C_n)|_{T_c} = g(E_F) k_B \beta_c^2 \left(\frac{d\Delta^2}{d\beta} \right) |_{T_c} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial f}{\partial |\varepsilon|} \right) d\varepsilon. \quad (17)$$

La integral es igual a la unidad

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial f}{\partial |\varepsilon|} \right) d\varepsilon = -\frac{1}{e^{\beta\varepsilon} + 1} \Big|_{-\infty}^{\infty} = 1,$$

donde se utilizó el hecho de que $\partial f / \partial |\varepsilon| = \partial f / \partial \varepsilon$ ya que $\partial f / \partial \varepsilon$ es una función par de ε . Haciendo uso de la regla de la cadena podemos cambiar la derivada del “gap” con respecto de β por la derivada con respecto de T

$$\frac{d\Delta^2}{d\beta} = \frac{d\Delta^2}{dT} \frac{dT}{d\beta} = \left(-\frac{d\Delta^2}{dT} \right) k_B^{-1} \beta^{-2}.$$

Sustituyendo este último resultado en (17) tenemos

$$\Delta C = g(E_F) \left(-\frac{d\Delta^2}{dT} \right)_{T_c}. \quad (18)$$

Sustituyendo (16) en (18) tenemos

$$\Delta C = -g(E_F) \frac{d}{dT} \left[1.74 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/2} \Delta(0) \right]_{T_c}^2,$$

haciendo la derivada y ayudándonos de (2) llegamos a

$$\Delta C = 9.4g(E_F)k_B^2T_c. \quad (19)$$

Evaluable (15) en $T = T_c$ y comparando con ΔC finalmente tenemos

$$\frac{\Delta C}{C_n} = 1.43. \quad (20)$$

Este resultado será comparado en el Capítulo 4 con el salto deducido por la teoría de la condensación de Bose-Einstein la cual se tratará en el siguiente capítulo.

Capítulo 3

Superconductividad como una Condensación Bose-Einstein

3.1 Introducción.

Consideremos un gas cuántico ideal de bosones permanentes (es decir, se conserva el número de estos) con una relación de dispersión general en d dimensiones. Definamos T_c como la temperatura crítica la cual divide los estados de la materia: condensado y normal (no condensado). Entendiéndose por estado condensado aquél en el que existe un número de partículas, comparable al total de éstas, las cuales se encuentran en el estado de mínima energía, ($k = 0$), es decir, en un mismo nivel de energía (en el estado base).

Para la relación de dispersión cuadrática un número macroscópico de bosones existen en el estado base cuántico por abajo de la temperatura crítica, T_c , solamente si $d > 2$.

La distribución de Bose-Einstein sumada sobre todos los estados nos da el número total de bosones N . Propongamos N_0 como el número de partículas en el estado más bajo ($\epsilon_k = 0$ en el límite termodinámico). Explícitamente

$$N = N_0(T) + \sum_{k \neq 0} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu_B)} - 1}, \quad (21)$$

donde $\beta \equiv 1/k_B T$ y μ_B es el potencial químico de los bosones. Para $T > T_c$, $N_0(T)$ es despreciable comparado con N ; para $T < T_c$, llega a ser comparable con N . Justamente en $T = T_c$, $N_0(T_c)/N \simeq 0$, mientras que en $T = 0$ la suma en la Ec. (21) se va a cero haciendo que $N = N_0$, es decir, no tenemos partículas en estados excitados.

Para valores positivos del potencial químico cuando $\epsilon_k \leq \mu_B$ la exponencial de la distribución de Bose-Einstein es más pequeña que la unidad y por lo tanto

$$f(\epsilon_k) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu_B)} - 1} \leq 0, \quad (22)$$

lo cual nos dice que el número de partículas más probable en el estado k es un número negativo. Como esto no tiene sentido físico, llegamos a la conclusión de que el potencial químico para bosones es negativo, esto es

$$\mu_B \leq 0.$$

Si el volumen que contiene a las partículas es muy grande el espectro de estados se vuelve cuasi-continuo y en este caso podemos transformar la suma de (21) en una integral de la siguiente forma

$$N = N_0(T) + \int_0^\infty [e^{\beta(\epsilon_k - \mu_B)} - 1]^{-1} a(k) dk \quad (23)$$

donde $a(k)$ es la densidad de estados energéticos en el espacio k . El lector se podría preguntar por qué la integral parte de cero si en la Ec. (21) se restringe la suma de la distribución de Bose-Einstein a $k \neq 0$. Sin embargo, más adelante veremos que $a(k)$ es cero al evaluarla en $k = 0$; por lo que no afecta a la integral de la ecuación anterior el agregarle $k = 0$. Precisamente éste es el motivo por el cual $N_0(T)$ no se introduce en la integral, ya que $N_0(T)$ no necesariamente es cero. Antes de continuar deduzcamos $a(k)$. Consideremos una red periódica d -dimensional de C^d celdas primitivas dentro de un hipercubo de arista L . Apliquemos las condiciones de contorno periódico sobre estas C^d celdas primitivas

$$e^{i[k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3 + \dots + k_d x_d]} = e^{i[k_1(x_1 + L) + k_2(x_2 + L) + k_3(x_3 + L) + \dots + k_d(x_d + L)]}$$

esto implica que

$$k_1 L, k_2 L, k_3 L, \dots, k_d L = 2n\pi$$

donde n es un número entero. De lo anterior se sigue que

$$k_1, k_2, k_3, \dots, k_d = 0, \pm 2\pi/L, \pm 4\pi/L, \dots, C\pi/L;$$

por lo que existe un solo valor permitido para k por hipervolumen $(2\pi/L)^d$ en el espacio k , es decir

$$\frac{1}{(2\pi/L)^d}$$

Sea M el número total de valores permitidos para k dentro de una hiperesfera. Como el volumen de una hiperesfera de radio k en $d \geq 0$ dimensiones está dado por el apéndice C de [10]

$$V_d(k) = \pi^{d/2} k^d / \Gamma(1 + d/2),$$

(para $d = 3$ por medio de esta ecuación tenemos que el volumen de la esfera es $4\pi R^3/3$; para $d = 2$, la cual es el área de un círculo de radio R , $V_2(R) = \pi R^2$; para $d = 1$ es el “diámetro” de una línea de “radio” R , $V_1(R) = 2R$; y para $d = 0$ tenemos la unidad) entonces tenemos que

$$\frac{1}{(2\pi/L)^d} = \frac{M}{\pi^{d/2} k^d / \Gamma(1 + d/2)}.$$

Así el número total de valores permitidos para k dentro de una hiperesfera de radio k es

$$M = (L/2\pi)^d \frac{\pi^{d/2} k^d}{\Gamma(1 + d/2)}. \quad (24)$$

La densidad de estados es

$$a(k) = dM/dk = (L/2\pi)^d \frac{d\pi^{d/2} k^{d-1}}{\Gamma(1 + d/2)}. \quad (25)$$

la cual es cero si la evaluamos en $k = 0$. Sustituyendo (25) en (23) obtenemos

$$N = N_0(T) + (L/2\pi)^d \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \int_0^\infty dk k^{d-1} [e^{\beta(\epsilon_k - \mu_B)} - 1]^{-1}. \quad (26)$$

Con lo anterior hemos demostrado que la sustitución de una suma por una integral consiste en escribir

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \frac{L^d}{2\pi} \int dk k^{d-1}. \quad (27)$$

3.2 Temperatura de transición al estado condensado.

Consideremos la relación de dispersión en forma de ley de potencia

$$\epsilon_k = c_s k^s, \quad \text{con } s > 0. \quad (28)$$

Para bosones ordinarios de masa m en el vacío, $s = 2$ y $c_s = \hbar^2/2m$, mientras que para los pares de Cooper en el mar de Fermi $s = 1$ (ver pág. 184 de [5]). Sustituyendo la forma de ϵ dada por

la Ec. (28) en la integral I que forma parte de la Ec. (26) tenemos

$$I = \int_0^\infty dk k^{d-1} [z^{-1} e^{\beta c_s k^s} - 1]^{-1},$$

donde z es la fugacidad definida como

$$z \equiv e^{\beta \mu_B};$$

con μ_B el potencial químico bosónico. Veamos un poco el comportamiento de z . El número de bosones que se encuentran en el estado base, es decir, con $\epsilon_k = 0$, son descritos por la distribución de Bose-Einstein de la siguiente manera

$$N_0(T) = [e^{-\beta \mu_B} - 1]^{-1},$$

o bien

$$N_0(T) = [z^{-1} - 1]^{-1},$$

despejando z obtenemos

$$z = \frac{N_0(T)}{N_0(T) + 1}; \quad (29)$$

como $N_0(T)$ es comparable con N para $T < T_c$, y z es continua en $T = T_c$, entonces, podemos decir que también para esta temperatura $N_0(T_c) \gg 1$. Así, en la región del condensado, es decir, para $T \leq T_c$ $z \cong 1$ y entonces $\mu_B \cong 0$.

Así también a altas temperaturas ($T > T_c$) $N_0(T) \cong 0$, por tanto $z \cong 0$.

Volviendo a la ecuación (26), en [11] se introdujo el cambio de variable de integración $x = \beta c_s k^s$ en la integral I para obtener la siguiente expresión de la fracción del condensado

$$\frac{N_0(T)}{N_0(0)} = 1 - \frac{\Gamma(d/s) g_{d/s}(z)}{s(\beta c_s)^{d/s} 2^{d-1} \pi^{d/2} \Gamma(d/2) n_B} \quad (30)$$

donde $n_B \equiv N/L^d$ y

$$g_{d/s}(z) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^{d/s}}, \quad (31)$$

es la función de Bose. Se puede demostrar que cuando $d/s > 1$, $g_{d/s}(1)$ es igual a la función zeta de Riemann, $\zeta(\sigma)$, resultado que se utilizará en cálculos posteriores para trabajar con la zeta

de Riemann en lugar de trabajar con $g_{d/s}(1)$. En (30) se utilizó el hecho de que a $T = 0$ todos los bosones se encuentran en el estado base es decir $N = N_0(T = 0)$. Para $T \leq T_c$, caso en que $z = 1$, la fracción del condensado tiene la siguiente forma

$$\frac{N_0(T)}{N_0(0)} = 1 - \frac{\Gamma(d/s)g_{d/s}(1)}{s(\beta c_s)^{d/s}2^{d-1}\pi^{d/2}\Gamma(d/2)n_B}. \quad (32)$$

Utilizando el hecho de que $N_0(T)$ es despreciable comparado con N en el intervalo de temperaturas $T \geq T_c$ podemos llegar a la fórmula general de T_c a partir de (32). Así, evaluando (32) en T_c tenemos

$$1 = \frac{\Gamma(d/s)g_{d/s}(1)}{s(\beta_c c_s)^{d/s}2^{d-1}\pi^{d/2}\Gamma(d/2)n_B}; \quad (33)$$

por último, despejando T_c

$$T_c = \frac{c_s}{k_B} \left[\frac{s\Gamma(d/2)2^{d-1}\pi^{d/2}n_B}{\Gamma(d/s)g_{d/s}(1)} \right]^{s/d}. \quad (34)$$

Para el caso de bosones ordinarios para los cuales $s = 2$ y $c_s = \hbar^2/2m_B$ la ecuación (34) resulta

$$T_c = \frac{\hbar^2}{2m_B k_B} \left[\frac{2^d \pi^{d/2} n_B}{g_{d/2}(1)} \right]^{2/d}. \quad (35)$$

Para $d = 1$ y $d = 2$ esta ecuación conduce a $T_c = 0$ debido a que

$$g_{1/2}(1) = \sum_{l=1}^{\infty} l^{-1/2} \rightarrow \infty$$

y

$$g_1(1) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l} \rightarrow \infty.$$

En general para $d \leq 2$, $g_{d/2}(1)$ diverge, por lo que $T_c = 0$ para $d \leq 2$. Cuando $d = 3$,

$$T_c = \frac{\hbar^2}{2m_B k_B} \frac{2^2 \pi n_B^{2/3}}{[g_{3/2}(1)]^{2/3}},$$

que se reduce a un resultado familiar:

$$T_c = \frac{3.31 \hbar^2 n_B^{2/3}}{m_B k_B}, \quad (36)$$

donde se utilizó el hecho de que para $d/s > 1$, $g_{d/s}(1) = \zeta(d/s)$. Cuando $d = 3$ y $s = 2$ se tiene $\zeta(3/2) \cong 2.612$.

Volviendo a la forma generalizada, la Ec. (30) se puede expresar como sigue

$$\frac{N_0(T)}{N_0(0)} = 1 - T^{d/s} \frac{\Gamma(d/s)g_{d/s}(1)}{s(c_s/k_B)^{d/s}2^{d-1}\pi^{d/2}\Gamma(d/2)n_B};$$

y sustituyendo (34) en la ecuación anterior se obtiene

$$\frac{N_0(T)}{N_0(0)} = 1 - (T/T_c)^{d/s}. \quad (37)$$

Este resultado es congruente con el resultado que se obtuvo en la pág. 162 de [10] para la fracción del condensado en el caso de $d = 3$ y $s = 2$. Estos resultados son formalmente válidos para todo $d > 0$ y $s > 0$.

Nótese que para $0 < d \leq s$, $T_c = 0$ ya que $g_{d/s}(1)$ diverge para $d/s \leq 1$. Este comportamiento de $g_{d/s}(1)$ implica que la condensación de Bose-Einstein (CBE) con $T_c \neq 0$ no ocurre cuando tenemos una relación de dispersión de orden s en una dimensión d tal que $d \leq s$. Este resultado es consistente con el bien conocido hecho de que la CBE *no ocurre en dimensiones igual o menor que dos* para una relación de dispersión cuadrática, que es el caso de bosones ordinarios con masa $m_B \neq 0$. Esto excluye de una posible interpretación como una condensación a la Bose-Einstein para superconductores orgánicos descubiertos a finales de los años setentas los cuales pueden considerarse de estructura casi unidimensional $(1 + \varepsilon)$ [2]. Sin embargo, si nos vamos al límite de acoplamiento débil de los pares de Cooper, podemos aproximar la relación de dispersión de estos cuasi-bosones mediante una relación lineal, $s = 1$ [11]. Para $s = 1$ puede ocurrir una CBE para toda $d > 1$ pero nunca para $d = 1$. Con lo anterior, estaríamos en la posibilidad de considerar como una fase condensada a la fase superconductor de los orgánicos.

Una relación de dispersión lineal describe a los pares de Cooper moviéndose no en el vacío sino en un mar de Fermi [11]. Tales pares pueden así condensarse de acuerdo a la teoría de Bose-Einstein en dimensión mayor que uno. Precisamente todos los materiales superconductores

descubiertos experimentalmente son de dimensión mayor que uno. Las dimensiones más bajas en las que se han encontrado los materiales superconductores son cuasi-unidimensionales ($d = 1 + \epsilon$), estos materiales son orgánicos consistiendo de cadenas paralelas de moléculas. No se han encontrado materiales superconductores en $d = 1$. Por esto podemos decir que existe un buen acuerdo entre el modelo de CBE para la superconductividad y los experimentos.

En el Apéndice A se demuestra que la temperatura de transición deducida por Gould *et al.* [12], la cual está dada por

$$T_c/T_0 = \left[\frac{s/d}{I(1, -1, d/s - 1, \infty)} \right]^{s/d}, \quad (38)$$

es idéntica a la expresada en la Ec. (34), donde T_0 se define en dicho Apéndice. Aquí, $I(1, -1, d/s - 1, \infty)$ es la integral

$$I(z, s, a, x_{max}) = \int_0^{x_{max}} dx \frac{x^a}{z^{-1}e^x + s}.$$

También se argumenta que el procedimiento para obtener tal resultado es análogo al utilizado en la Ref. [11].

3.3 Energía interna.

La energía interna de un sistema ideal de bosones, donde cada uno tiene una energía de excitación ϵ_k , está descrita por la distribución de Bose-Einstein, $[e^{\beta(\epsilon_k - \mu_B)} - 1]^{-1}$. Si $U(L^d, T)$ representa la energía interna, entonces,

$$U(L^d, T) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1}, \quad (39)$$

donde, para simplificar la notación, se le ha quitado el subíndice B a la μ . En [11] se demuestra que la energía interna se reduce a la siguiente forma

$$U(L^d, T) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{\Gamma(d/s + 1)}{s c_s^{d/s}} \frac{g_{d/s+1}(z)}{\beta^{d/s+1}} \equiv B_d \frac{g_{d/s+1}(z)}{\beta^{d/s+1}}, \quad (40)$$

donde el coeficiente B_d está dado por

$$B_d \equiv \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^d \frac{\Gamma(d/s + 1)}{s c_s^{d/s}}. \quad (41)$$

También en la Ref. [11] se da una expresión para la energía libre que es *válida para toda T* e independiente de B_d , ésta es

$$\frac{U(L^d, T)}{Nk_B T} = \frac{d}{s} \frac{g_{d/s+1}(z)}{g_{d/s}(1)} t^{d/s}, \quad (42)$$

con $t = T/T_c$. En la Fig. 3.1 se exhibe la energía interna (en unidades de $Nk_B T$) como una función de la temperatura reducida para $(d, s) = (3, 2)$, $(2, 1)$ y $(3, 1)$. Notemos un punto muy importante: las asíntotas de la energía interna, $U/Nk_B T = 3/2$, 2 y 3 , son los límites clásicos comúnmente conocidos para $d = 3$ y $s = 2$. Cuando la temperatura pasa por T_c la curva tiene un punto de inflexión. El caso $(d, s) = (3, 1)$ posee una discontinuidad en la derivada en este punto, mientras que los otros dos casos nada más cambian en su curvatura. Es decir, para $(d, s) = (3, 1)$ el calor específico tiene una discontinuidad en $T = T_c$. En la siguiente sección se estudia la discontinuidad.

3.4 Calor específico.

El calor específico a volumen constante C_V se define por

$$C_V = (\partial U / \partial T)_{N, V}. \quad (43)$$

Utilizando el hecho de que $z \cong 1$ para $T \leq T_c$, C_V está dado, para dicho rango de temperaturas, por

$$C_V = B_d \left[\frac{(d/s + 1)k_B g_{d/s+1}(1)}{\beta^{d/s}} \right] = Nk_B \frac{(d/s)(d/s + 1)g_{d/s+1}(1)}{g_{d/s}(1)} t^{d/s} \propto T^{d/s}. \quad (44)$$

Finalmente, utilizando $N_0(T)/N \cong 0$ para $T \geq T_c$ en la Ref. [11] se demuestra que

$$C_V = Nk_B \left[\frac{(d/s)(d/s + 1)g_{d/s+1}(z)}{g_{d/s}(z)} - \frac{(d/s)^2 g_{d/s}(z)}{g_{d/s-1}(z)} \right], \quad t \geq 1. \quad (45)$$

Cerca de T_c^- , ($t \cong 1$), la Ec. (44) toma el valor

$$C_V(T_c^-)/Nk_B = \frac{d}{s} \frac{(d/s + 1)g_{d/s+1}(1)}{g_{d/s}(1)} \quad (46)$$

mientras que cerca pero por arriba de T_c , ($t \cong 1$), la ecuación (45), resulta

$$C_V(T_c^+)/Nk_B = \left[\frac{(d/s)(d/s + 1)g_{d/s+1}(1)}{g_{d/s}(1)} - \frac{(d/s)^2 g_{d/s}(1)}{g_{d/s-1}(1)} \right]. \quad (47)$$

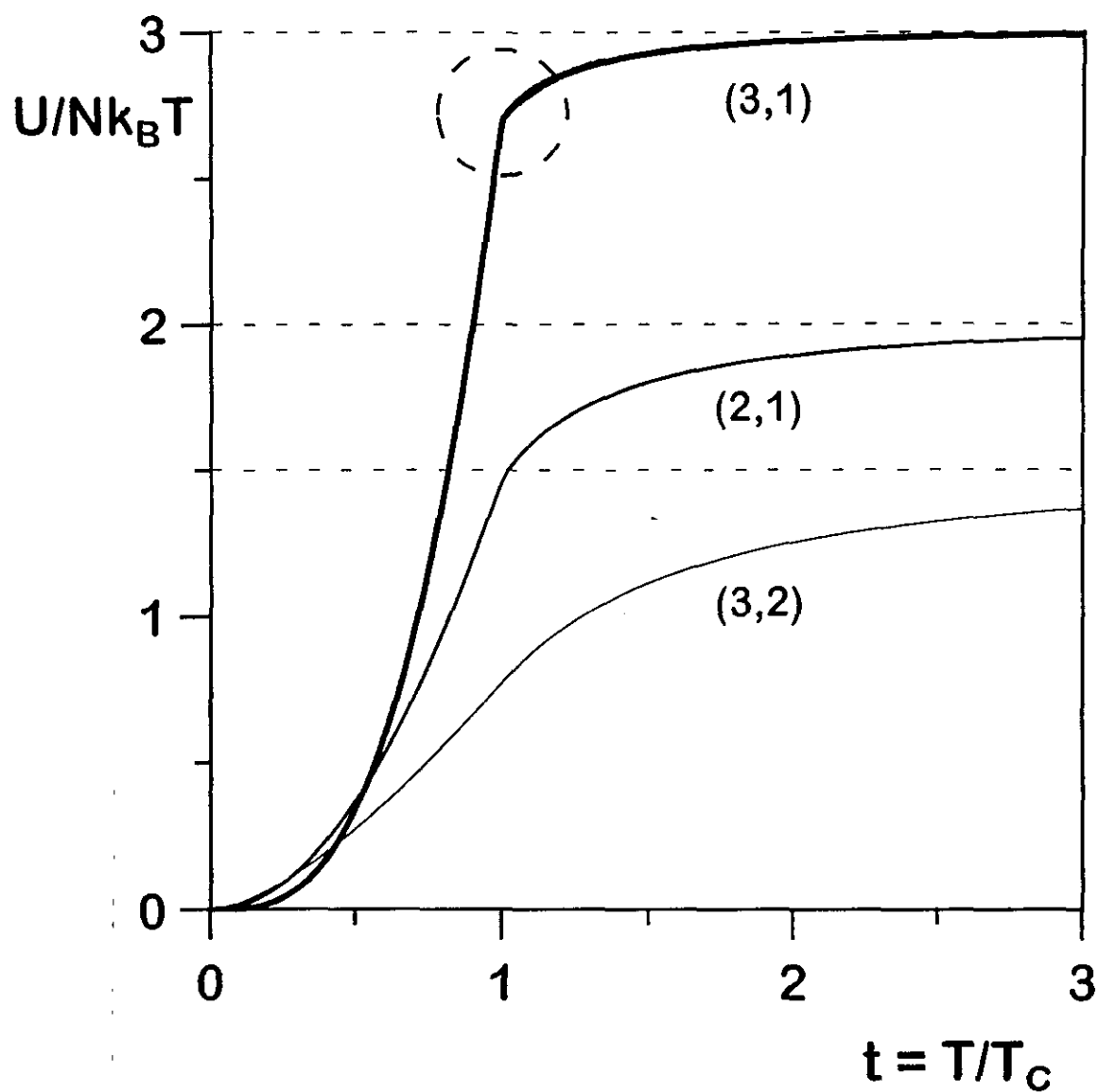


Figura 3.1. Energía interna (en unidades de $Nk_B T$) como una función de la temperatura (en unidades de T_c) para $(d, s) = (3, 2)$, $(2, 1)$ y $(3, 1)$ (Fig. tomada de [11]).

De estas dos ecuaciones nos damos cuenta que en $T = T_c$ el calor específico es discontinuo. El valor de esta discontinuidad está dada por la diferencia entre las Ecs. (46) y (47)

$$[\Delta C_V/Nk_B]_{T_c} \equiv [C_V(T_c^-) - C_V(T_c^+)]/Nk_B = \frac{(d/s)^2 g_{d/s}(1)}{g_{d/s-1}(1)}. \quad (48)$$

Sabemos que $g_\sigma(1)$ diverge cuando $\sigma \leq 1$; por esto, cuando $d/s - 1 \leq 1$ o bien $d/s \leq 2$ el lado derecho de la ecuación (48) se hace cero. Es decir, para materiales en d -dimensiones con portadores de carga descritos por una relación de dispersión de orden s , de la forma $\epsilon_k = c_s k^s$, tal que $d/s \leq 2$ no exhiben discontinuidad en el calor específico al pasar del estado condensado al estado normal o viceversa. Sin embargo, para $d/s > 2$ hay una discontinuidad en el calor específico.

El caso más común de esto es el hecho de que un gas ideal de Bose con $s = 2$ y $d = 3$ exhibe únicamente una cúspide en forma de pico en su calor específico en $T = T_c$, es decir, exhibe discontinuidad solamente en su derivada. Dicha discontinuidad de las derivadas, $\partial C_V/\partial T|_{T_c^-} - \partial C_V/\partial T|_{T_c^+}$ la podemos obtener usando las Ecs. (44) y (45). Así pues, para $(d, s) = (3, 1)$ existe discontinuidad en el calor específico al pasar por T_c , mientras que para $(2, 1)$ y $(3, 2)$ solamente la derivada de C_V con respecto de T es discontinua.

Cuando el salto en el calor específico es distinto de cero ($d/s > 2$) tanto a la discontinuidad como a $C_V(T_c^-)$ los podemos escribir en términos de la función zeta de Riemann, $\zeta(\sigma)$, a saber

$$[\Delta C_V/Nk_B] = \frac{(d/s)^2 \zeta(d/s)}{\zeta(d/s - 1)}.$$

y

$$C_V(T_c^-)/Nk_B = \frac{(d/s)(d/s + 1)\zeta(d/s + 1)}{\zeta(d/s)}.$$

Dividiendo estas dos últimas ecuaciones

$$\frac{\Delta C_V(T_c)}{C_V(T_c^-)} = \frac{(d/s)\zeta^2(d/s)}{(d/s + 1)\zeta(d/s - 1)\zeta(d/s + 1)}. \quad (49)$$

Para altas temperatura $[\exp \beta(\epsilon_k - \mu_B) - 1]^{-1}$ es muy pequeño por lo que $[\exp \beta(\epsilon_k - \mu_B) - 1]$ es muy grande; en este caso, podemos ignorar el uno. Así la Ec. (21) se simplifica a

$$N \xrightarrow{T \rightarrow \infty} e^{\beta\mu} \sum_k e^{-\beta c_s k^s}. \quad (50)$$

Usando la Ec. (27) podemos realizar la suma de la ec. (50) obteniendo

$$N/L^d \rightarrow \frac{e^{\beta\mu}}{s} \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \frac{\Gamma(d/s)}{(2\pi)^d (\beta c_s)^{d/s}}. \quad (51)$$

Esta ecuación puede reescribirse en la forma

$$z \equiv e^{\beta\mu} \rightarrow \frac{d}{s} \frac{N}{B_d} \beta^{d/s}. \quad (52)$$

donde B_d se definió en la Ec. (41). Como β se va a cero cuando T se va a infinito, entonces z se va a cero cuando T se va a infinito que es lo que se demostró anteriormente analizando el comportamiento de la fracción condensada con la temperatura. Como también ya vio, del resultado anterior y de la forma de $g_\sigma(z)$ dada por la ecuación (31), resulta que cuando T tiende a infinito $g_\sigma(z)$ tiende a z . Así a altas temperaturas sustituyendo $g_\sigma(z) = z$ en la Ec. (45) tenemos

$$C_V/Nk_B \rightarrow d/s, \quad (53)$$

que es una generalización de la ley de Dulong-Petit.

3.5 Relación de dispersión tomando en cuenta el “gap” de excitación.

En la teoría BCS para el fenómeno de la superconductividad no se toma en cuenta los estados excitados, $k \neq 0$, para los pares de electrones llamados pares de Cooper, sólo se consideran los pares de electrones cuyo momento lineal total, $\hbar k$, es igual a cero. Para considerar la superconductividad como una condensación de Bose-Einstein la fracción de pares de Cooper con momento total distinto de cero se debe tomar en cuenta y puede demostrarse que dicha fracción es grande y no puede despreciarse, más aún, existen a temperaturas mayores que la temperatura de transición [13].

La distribución de pares es máxima alrededor de $k = 0$ y el número de pares con $k > 0$ decae monotónicamente conforme k crece. Este decaimiento se hace más pronunciado conforme $\nu = k_D^2/k_F^2$ es más pequeño (k_D y k_F son el número de onda de Debye y de Fermi, respectivamente). Sin embargo, el número de pares con k en el intervalo $0 < k \lesssim 10^{-4}(2\sqrt{k_F^2 + k_D^2})$ es mayor que el 90% del número de pares con $k = 0$, para $\nu > 0.005$ como la de los superconductores de alta T_c [13]. Uno de los efectos que pueden tener los pares con momento total no nulo en la superconductividad es el suavizar la transición superconductor.

Para que los pares de Cooper puedan estar en un estado excitado, digamos para que dicho par esté en el primer estado excitado, tiene que adquirir cierta energía $\varepsilon_g(T)$ para poder alcanzar dicho estado. Supongamos un “gap” de energía, $\varepsilon_g(T)$, entre el estado base y el primer estado excitado, y consideremos que

$$\epsilon_k = \varepsilon_g(T) + c_s k^s \quad (54)$$

describe a los pares de Cooper tratados como bosones en la teoría de condensación de BE. Introduciendo esta expresión a la ecuación (26) tenemos

$$N = N_0(T) + (L/2\pi)^d \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \int_0^\infty dk k^{d-1} [e^{\beta(\varepsilon_g(T) + c_s k^s - \mu)} - 1]^{-1},$$

definiendo $\tilde{z} \equiv e^{\beta(\mu - \varepsilon_g(T))}$, la ecuación anterior la podemos escribir como

$$N = N_0(T) + (L/2\pi)^d \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \int_0^\infty dk k^{d-1} [\tilde{z}^{-1} e^{\beta c_s k^s} - 1]^{-1}. \quad (55)$$

De esta ecuación es fácil ver que el problema para obtener la temperatura de transición se reduce al caso en el cual la relación de dispersión era $\epsilon_k = c_s k^s$, para esto basta reemplazar z por \tilde{z} en donde quiera que se encuentre. Así, de la Ec. (34) se obtiene

$$T_c = \frac{c_s}{k_B} \left[\frac{s\Gamma(d/2)2^{d-1}\pi^{d/2}n_B}{\Gamma(d/s)g_{d/s}(e^{-\beta_c\varepsilon_g(T_c)})} \right]^{s/d},$$

ya que en la Ec. (34) $g_{d/s}(1)$ es en realidad $g_{d/s}(z = 1)$ y como $\tilde{z} = ze^{-\beta\varepsilon_g}$, entonces, al reemplazar z por \tilde{z} nos queda $g_{d/s}(e^{-\beta\varepsilon_g})$. Pero si el “gap” ε_g se va a cero cuando T se va a T_c ,

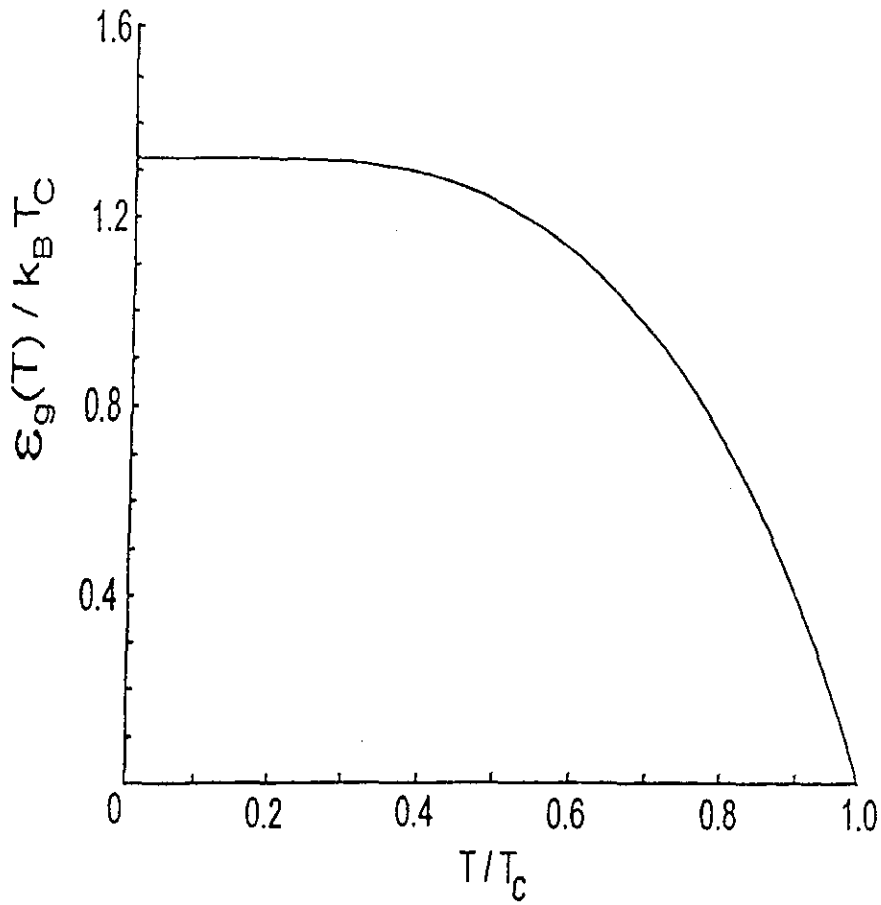


Figura 3.2. Variación del “gap” bosónico de energía, $\epsilon_g(T)$, como función de la temperatura el cual da la mínima energía de excitación de los bosones. Esta figura ilustra que $\epsilon_g(T)$ es cero cuando $T \geq T_c$ (tomada de [5] pág. 211).

como lo afirma Fujita en el capítulo 10 de Ref. [5] (ver Fig. 3.2), entonces para el presente caso en que $\epsilon_k = \epsilon_g(T) + c_s k^s$, T_c es la misma que si tuviéramos la relación de dispersión sin tomar en cuenta el “gap”: $\epsilon_k = c_s k^s$ (ver ecuación (34)).

Por otro lado, la energía interna para la relación de dispersión que contiene al “gap” está dada por

$$U(L^d, T) = (L/2\pi)^d \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \int_0^\infty dk \frac{k^{d-1} (\epsilon_g(T) + c_s k^s)}{\tilde{z}^{-1} e^{\beta c_s k^s} - 1}. \quad (56)$$

Evidentemente tenemos dos sumandos con una integral cada uno. Tomando z como \tilde{z} el primer sumando (cuya integral contiene ϵ_g) es idéntico a (26) cuando $N_0(T) = 0$ sólo que multiplicado

por ϵ_g y el segundo sumando (cuya integral contiene $c_s k^s$) es idéntico al de la energía interna para la relación de dispersión $\epsilon_k = c_s k^s$. Tomando en cuenta estas observaciones podemos usar la Ec. (30) en la forma

$$N = N_0(T) + (L/2\pi)^d \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \frac{1}{s(\beta c_s)^{d/s}} \Gamma(d/s) g_{d/s}(\tilde{z}) \quad (57)$$

o bien

$$\frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{d/s} \left[\frac{g_{d/s}(e^{-\beta\epsilon_g(T)})}{g_{d/s}(e^{-\beta_c\epsilon_g(T_c)})} \right],$$

(que es el resultado de la ecuación (55)) con $N_0(T) = 0$ y la solución de la integral que nos llevó a la Ec. (40) para resolver las integrales de la Ec. (56) así obtenemos

$$U(L^d, T) = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \left[\frac{\epsilon_g}{s(\beta c_s)^{d/s}} \Gamma(d/s) g_{d/s}(\tilde{z}) + \frac{\Gamma(d/s + 1)}{s c_s^{d/s}} \frac{g_{d/s+1}(\tilde{z})}{\beta^{d/s+1}} \right].$$

Introduciendo B_d cuyo valor está dado por la ecuación (41) esta última ecuación se transforma en

$$U(L^d, T) = B_d (k_B T)^{d/s+1} \left[\frac{\epsilon_g(T) \beta \Gamma(d/s)}{\Gamma(d/s + 1)} g_{d/s}(\tilde{z}) + g_{d/s+1}(\tilde{z}) \right]. \quad (58)$$

La ecuación (57) en términos de B_d es

$$N = N_0(T) + \frac{s}{d} B_d \frac{g_{d/s}(\tilde{z})}{\beta^{d/s}}. \quad (59)$$

En $T = T_c$, $N_0(T_c)/N = 0$ y $\mu = 0$, por lo que la Ec. (59) resulta

$$\frac{B_d}{N \beta_c^{d/s}} = \frac{d/s}{g_{d/s}(e^{-\beta_c \epsilon_g(T_c)})} \quad (60)$$

o bien, para $\epsilon_g(T_c) = 0$ (ver Fig. 3.2),

$$\frac{B_d}{N \beta_c^{d/s}} = \frac{d/s}{g_{d/s}(1)}. \quad (61)$$

Podemos sustituir en la ecuación (58) el valor de B_d pero ahora en su forma dada por la ecuación anterior

$$\frac{U(L^d, T)}{N} = \frac{(1/k_B T_c)^{d/s} (k_B T)^{d/s+1}}{g_{d/s}(1)} \frac{d}{s} \left[\frac{\epsilon_g(T) \beta \Gamma(d/s)}{\Gamma(d/s + 1)} g_{d/s}(\tilde{z}) + g_{d/s+1}(\tilde{z}) \right],$$

reduciendo y reordenando términos llegamos a la siguiente expresión

$$\frac{U(L^d, T)}{Nk_B T} = \frac{d}{s} \frac{\left[\frac{\varepsilon_g(T)\beta\Gamma(d/s)}{\Gamma(d/s+1)} g_{d/s}(\tilde{z}) + g_{d/s+1}(\tilde{z}) \right]}{g_{d/s}(1)} (T/T_c)^{d/s}.$$

De la definición de la función gamma

$$\frac{\Gamma(d/s)}{\Gamma(d/s+1)} = \frac{(d/s-1)!}{(d/s)!} = \frac{1}{d/s}$$

la última expresión para la energía interna se reduce a

$$\frac{U(L^d, T)}{Nk_B T} = \frac{1}{g_{d/s}(1)} \left[\varepsilon_g(T)\beta g_{d/s}(\tilde{z}) + \frac{d}{s} g_{d/s+1}(\tilde{z}) \right] (T/T_c)^{d/s}. \quad (62)$$

A pesar de que la forma de B_d que acabamos de introducir en la energía interna se obtuvo del número de bosones evaluado en T_c , la expresión anterior es válida para toda T ya que B_d no es función de la temperatura.

Para $T \leq T_c$ el potencial químico es prácticamente cero ($\mu = 0$) y por tanto (62) en este rango de temperaturas se reescribe como

$$\frac{U(L^d, T)}{Nk_B T} = \frac{1}{g_{d/s}(1)} \left[\varepsilon_g(T)\beta g_{d/s}(e^{-\beta\varepsilon_g}) + \frac{d}{s} g_{d/s+1}(e^{-\beta\varepsilon_g}) \right] t^{d/s} \quad (63)$$

donde $t \equiv T/T_c$. Cuando $d = 3$ y $s = 1$, como en un gas de fotones en tres dimensiones, esta expresión es la "Ley de Stefan-Boltzmann" $U(T) = \sigma T^4$, con σ no una constante si no una función de ε_g .

Por otro lado, para $T \geq T_c$, $N_0(T)$ es tan pequeño que comparado con N se puede considerar como cero, por lo que la expresión (59) se puede reescribir como

$$N = \frac{s}{d} B_d \frac{g_{d/s}(\tilde{z})}{\beta^{d/s}}.$$

Con la ayuda de (61) podemos eliminar B_d de la ecuación anterior y obtener, después de eliminar los términos comunes en el numerador y en el denominador y reordenar los términos que nos quedan, obtenemos la siguiente ecuación

$$g_{d/s}(\tilde{z}) = \frac{g_{d/s}(1)}{t^{d/s}}, \quad t \geq 1 \quad (64)$$

donde hemos utilizado el hecho de que $\beta_c/\beta = T/T_c \equiv t$. Podemos usar la Ec. (64) para eliminar $g_{d/s}(1)$ de la Ec. (62) y así obtener una expresión de la energía interna en el rango de temperaturas $t \geq 1$, esto es $T \geq T_c$,

$$\frac{U(L^d, T)}{Nk_B T} = \frac{d}{s} \frac{\left[\frac{\varepsilon_g(T)\beta\Gamma(d/s)}{\Gamma(d/s+1)} g_{d/s}(\tilde{z}) + g_{d/s+1}(\tilde{z}) \right]}{g_{d/s}(\tilde{z}) t^{d/s}} t^{d/s}$$

o, reordenando

$$\frac{U(L^d, T)}{Nk_B T} = \frac{d}{s} \left[\frac{\varepsilon_g(T)\beta\Gamma(d/s)}{\Gamma(d/s+1)} + \frac{g_{d/s+1}(\tilde{z})}{g_{d/s}(\tilde{z})} \right]. \quad (65)$$

Si para $t \geq 1$ $\varepsilon_g(T) = 0$ (ver Fig. 3.2), entonces, en la ecuación anterior el primer sumando es cero, y para el sumando que nos queda, podemos reemplazar \tilde{z} por z ; así la expresión para la energía interna a temperaturas mayores que T_c se reduce a la expresión (19) dada en [11] para este rango de temperaturas y de aquí que la energía interna siga teniendo la misma generalización del “Teorema de Equipartición de la Energía” que se tenía cuando no tomábamos en cuenta el “gap” de excitación (ver Ref. [11]).

Notemos que si ε_g no fuera cero para $T \geq T_c$, seguiríamos teniendo la generalización del “Teorema de Equipartición de la Energía”, sin embargo la energía por partícula aumentaría debido al valor de $\varepsilon_g(T)$, es decir

$$U(L^d, T) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} N\varepsilon_g(T) + \frac{d}{s} Nk_B T. \quad (66)$$

3.6 Calor específico para la relación de dispersión con “gap”.

Si $\varepsilon_g(T) = 0$ para toda $T \geq T_c$, entonces el calor específico, en esta región de temperaturas para nuestra nueva relación de dispersión, se reduce a la expresión (45) que se obtuvo con la relación de dispersión $\epsilon_k = c_s k^s$. Lo que queremos es encontrar la discontinuidad del calor específico en la temperatura de transición T_c utilizando la nueva relación de dispersión. Como ya sabemos lo que pasa con el calor específico arriba de T_c , nuestra ocupación es ahora encontrar la expresión de éste para temperaturas menores que T_c . Derivemos pues la energía interna dada

por (62) con respecto a T manteniendo constante el volumen y el número de partículas

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{1}{Nk_B} \left(\frac{\partial U(L^d, T)}{\partial T} \right)_{N, \nu} = \frac{(d/s + 1)(T/T_c)^{d/s}}{g_{d/s}(1)} \left[\varepsilon_g(T) \beta g_{d/s}(\tilde{z}) + \frac{d}{s} g_{d/s+1}(\tilde{z}) \right] \\ &+ \frac{t^{d/s} T}{g_{d/s}(1)} \left[(\beta d \varepsilon_g / dT - \varepsilon_g(T) \beta / T) g_{d/s}(\tilde{z}) + \varepsilon_g(T) \beta \frac{g_{d/s-1}(\tilde{z})}{\tilde{z}} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial T} + \frac{d}{s} \frac{g_{d/s}(\tilde{z})}{\tilde{z}} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial T} \right]. \end{aligned} \quad (67)$$

Para $T \leq T_c$ el potencial químico es prácticamente cero por lo que $\tilde{z} = e^{-\beta \varepsilon_g}$ y la derivada con respecto a la temperatura de ésta es por lo tanto $\partial \tilde{z} / \partial T = -e^{-\beta \varepsilon_g} \partial \beta \varepsilon_g(T) / \partial T$. Después de introducir este resultado en la ecuación (67) y asociar términos semejantes podemos llegar a la ecuación siguiente, la cual es válida sólo para temperaturas menores o iguales a T_c

$$\begin{aligned} \frac{C_V}{Nk_B} &= \frac{t^{d/s}}{g_{d/s}(1)} \left[d/s(d/s + 1) g_{d/s+1}(e^{-\beta \varepsilon_g}) + [2(d/s) \varepsilon_g(T) \beta - (d/s - 1) \frac{1}{k_B} \frac{d\varepsilon_g}{dT}] g_{d/s}(e^{-\beta \varepsilon_g}) \right] \\ &+ \frac{t^{d/s}}{g_{d/s}(1)} \left[(\varepsilon_g(T) \beta)^2 - \varepsilon_g(T) \beta^2 T \frac{d\varepsilon_g}{dT} \right] g_{d/s-1}(e^{-\beta \varepsilon_g}). \end{aligned} \quad (68)$$

Podemos darnos cuenta que esta ecuación está en concordancia con C_V cuando no tomábamos en cuenta el “gap” de excitación de las partículas, ya que si hacemos $\varepsilon_g(T) = 0$ en la Ec. (68), ésta se transforma en la ecuación (44) la cual es el calor específico para $T \leq T_c$ obtenido anteriormente sin tomar en cuenta ε_g . De la Fig. 3.2 podemos ver que en $T = T_c$ tenemos $\varepsilon_g(T) = 0$, así la Ec. (68) a dicha temperatura se reduce a

$$\frac{C_V(T_c^-)}{Nk_B} = \frac{d/s(d/s + 1) g_{d/s+1}(1)}{g_{d/s}(1)} - (d/s - 1) \frac{1}{k_B} \left[\frac{d\varepsilon_g}{dT} \right]_{T_c^-}. \quad (69)$$

Como ya se había mencionado, para $T \geq T_c$ el calor específico está dado por la ecuación (45) ya que para este rango de temperaturas el “gap” $\varepsilon_g(T)$ es nulo; en consecuencia el calor específico en $T = T_c^+$ está dado por la Ec. (47). Con esto podemos llegar a nuestro objetivo: calcular la discontinuidad de C_V cuando pasa por la temperatura de transición. De las Ecs. (47) y (69) tenemos que

$$\frac{\Delta C_V}{Nk_B} = \frac{1}{Nk_B} [C_V(T_c^-) - C_V(T_c^+)] = \frac{(d/s)^2 g_{d/s}(1)}{g_{d/s-1}(1)} - (d/s - 1) \frac{1}{k_B} \left[\frac{d\varepsilon_g}{dT} \right]_{T_c}. \quad (70)$$

Cuando tenemos un material en una dimensión espacial d cuyas partículas están descritas por una relación de dispersión de orden s tal que $d/s - 1 \leq 1$, es decir $d/s \leq 2$ el primer sumando de

la Ec. (70) se va a cero porque en estas condiciones $g_{d/s-1}(1)$ diverge. Pero sólo cuando $d = s$ el segundo sumando de dicha ecuación se reduce a cero. De esto podemos concluir que sólo para $d = s$ no tenemos discontinuidad en el calor específico para $T = T_c$. Sin embargo cuando $d/s \leq 1$, según la Ec. (34), no hay estado condensado, ya que en estas condiciones $T_c = 0$. Es decir para toda d y s donde hay estado condensado tenemos que el calor específico es discontinuo al pasar por la temperatura de transición.

Así también podríamos pensar que la ecuación (70) para $d/s < 1$ nos dice que el salto en el calor específico es negativo, ya que la derivada de ε_g es negativa, esto es, ahora no se tiene que el valor máximo entre $C_V(T_c^-)$ y $C_V(T_c^+)$ es el primero de estos como usualmente ocurre, si no que ahora el valor máximo es $C_V(T_c^+)$. Sin embargo, este argumento no tiene sentido debido a que para $d/s \leq 1$ no hay CBE.

Por tanto, cuando consideramos $\varepsilon_g(T) \neq 0$, la teoría CBE siempre predice una discontinuidad en el calor específico de un superconductor, cuyo valor máximo es $C_V(T_c^-)$. Esto está de acuerdo con los resultados experimentales, ya que todos los materiales superconductores tienen una discontinuidad en el calor específico en $T = T_c$, con su valor máximo en $C_V(T_c^-)$.

Tabla 1. Casos en los que $\Delta C_V(T_c)$ es distinto o igual a cero.

	$\varepsilon_g(T) = 0$		$\varepsilon_g(T) \neq 0^*$	
	T_c	$\Delta C_V(T_c)$	T_c	$\Delta C_V(T_c)$
$d/s \leq 1$	0	nc**	0	nc**
$1 < d/s \leq 2$	$\neq 0$	0	$\neq 0$	$\neq 0$
$2 < d/s$	$\neq 0$	$\neq 0$	$\neq 0$	$\neq 0$

* con forma de $\varepsilon_g(T) \neq 0$ propuesta por Fujita en la pág. 211 de [5] donde $\varepsilon_g(T_c) = 0$;

** nc significa que no hay condensación a $T \neq 0$.

En la tabla 1 mostramos los intervalos de d/s para los cuales teóricamente, el calor específico

no presenta discontinuidad al cruzar la temperatura crítica. En esta tabla se muestran dos formas del “gap”: $\varepsilon_g(T) = 0$ y $\varepsilon_g(T) \neq 0$; esta última se refiere a la forma propuesta por Fujita (ver capítulo 10 de [5]).

Si pudiéramos tener algún material en una dimensión espacial d cuyos pares de Cooper estén descritos con una relación de dispersión de orden s con una ε_g tal que al llegar a su valor nulo en $T = T_c$ lo hicieran en una forma prácticamente inclinada, es decir, una ε_g tal que su derivada en $T = T_c$ fuera prácticamente infinita, entonces estaríamos describiendo una “transición lambda” (Fig. 3.3) la cual es la transición experimental del ^4He a su fase superfluida. Esta transición está descrita en la página 165 de [10].

Por otro lado cuando $d = 3$ y $s = 1$, y se considera el “gap” de mínima excitación en la relación de dispersión de los pares de Cooper tratados como partículas bosónicas, en la pág. 225 de Ref. [5] se obtiene

$$\frac{\Delta C_V}{Nk_B} = \frac{(3)^2 g_3(1)}{g_2(1)} - (3) \frac{1}{k_B} \frac{d\varepsilon_g}{dT} \Big|_{T_c}. \quad (71)$$

Sin embargo, nos damos cuenta que el resultado de la Ec. (70) conduce a

$$\frac{\Delta C_V}{Nk_B} = \frac{(3)^2 g_3(1)}{g_2(1)} - (3 - 1) \frac{1}{k_B} \frac{d\varepsilon_g}{dT} \Big|_{T_c}, \quad (72)$$

La diferencia entre estas dos ecuaciones es el coeficiente que multiplica a la derivada del “gap”. Comparando el desarrollo de esta tesis con el de Fujita, nos damos cuenta que este último no considera ε_g al multiplicar la distribución de estados por la energía de cada partícula para calcular la energía interna. La cual la obtiene como

$$U(L^3, T) = (L/2\pi)^3 \frac{2\pi^{3/2}}{\Gamma(3/2)} \int_0^\infty dk \frac{k^2 c_1 k}{e^{\beta(\varepsilon_g(T) + c_1 k - \mu_B)} - 1}. \quad (73)$$

Solamente considera el “gap” dentro de dicha distribución.

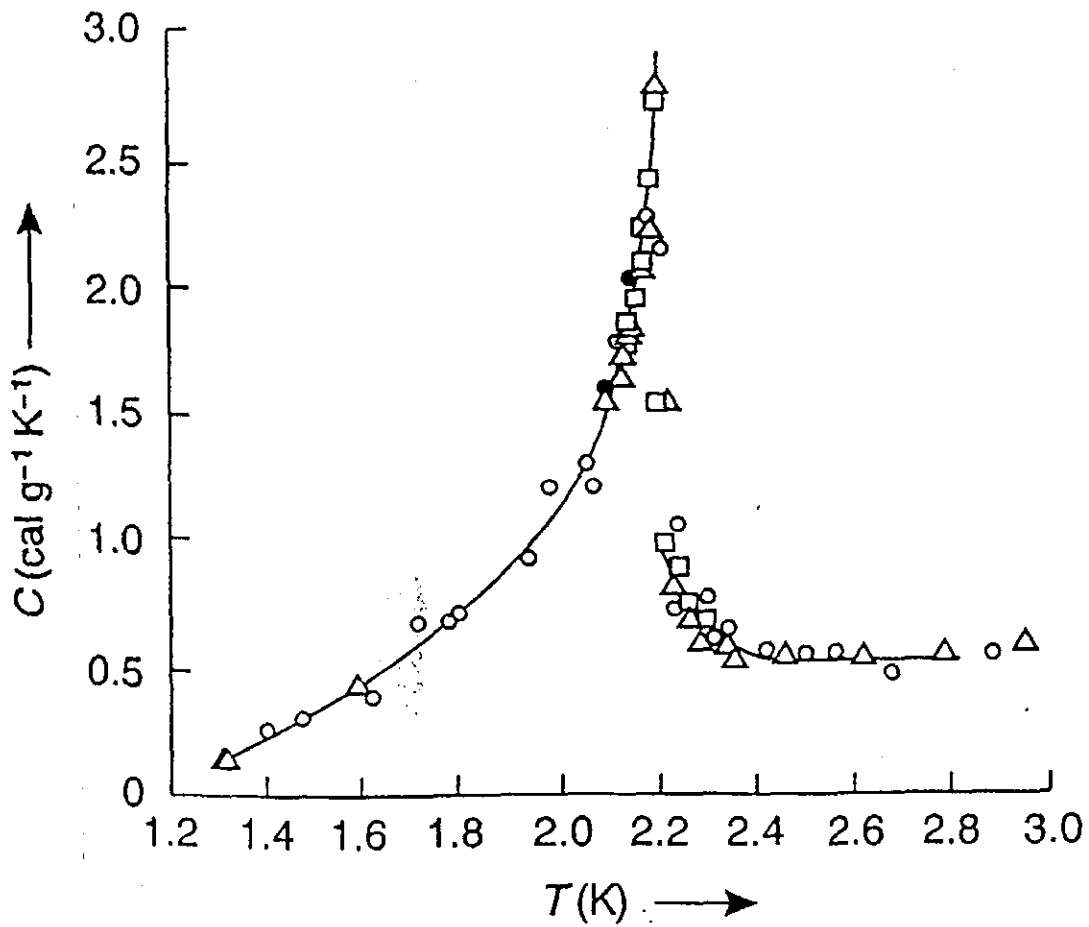


Figura 3.3. El calor específico del ^4He líquido (tomada de la pág. 165 de [10]).

Capítulo 4

Calores específicos

En este capítulo se comparan las teorías CBE y BCS para la superconductividad. Para esto se presentan resultados experimentales que nos permiten ver que tanto concuerdan dichas teorías con los experimentos.

En el Capítulo 2 se vio que según la teoría BCS en un superconductor tanto $\Delta C(T_c)$ como C_n (calor específico en el estado normal evaluado en T_c , $C_n(T_c^+)$) son proporcionales a la densidad de estados evaluada en el nivel de Fermi, $g(E_F)$. Por esto $\Delta C/C_n$ es independiente de dicha densidad, y de aquí que esta razón sea independiente de la dimensión espacial del sistema. De acuerdo a los resultados del Capítulo 2

$$\Delta C/C_n = 1.43. \quad (74)$$

El calor específico se obtuvo de la derivada de la entropía para cuasi-partículas fermiónicas llamadas bogolones que están formadas por una partícula y un hueco. A partir de (74) podemos obtener el valor teórico BCS para $\Delta C/C_s$; donde C_s es el calor específico en el estado superconductor evaluado en T_c , $C(T_c^-)$. Así pues, puede escribirse

$$\frac{\Delta C}{C_s} = \frac{\Delta C/C_n}{C_s/C_n},$$

sumando y restando la unidad al denominador del término del lado derecho

$$\frac{\Delta C}{C_s} = \frac{\Delta C/C_n}{\frac{C_s - C_n}{C_n} + 1},$$

y como $\Delta C = C_s - C_n$, esto implica que

$$\frac{\Delta C}{C_s} = \frac{\Delta C/C_n}{\Delta C/C_n + 1}. \quad (75)$$

Así, la teoría BCS conduce a

$$\frac{\Delta C}{C_s} = 0.588. \quad (76)$$

La teoría BCS considera que el efecto de los pares de Cooper con momento total $\hbar k$ distinto de cero es despreciable para el fenómeno de la superconductividad ya que es una cantidad muy pequeña en comparación de la cantidad de pares con momento total nulo por lo que sólo trabajan con $k = 0$. Sin embargo, se ha demostrado que la fracción de pares con momento total no nulo es importante y no puede pasar desapercibida [13].

Al considerar la superconductividad como una condensación de Bose-Einstein es necesario tomar en cuenta la existencia de pares de Cooper con $k > 0$. Como el espín total de los pares es entero, se comportan como partículas cuasi-bosónicas. Estos cuasi-bosones con momento total distinto de cero se pueden describir, en el límite de momentos pequeños, con la relación de dispersión lineal [14]

$$\epsilon_k \longrightarrow a(d)v_F\hbar k \quad (77)$$

donde $a(d)$ es un coeficiente adimensional, d la dimensión del sistema y k el momento total del par.

Para obtener el calor específico, y más precisamente la discontinuidad de éste en T_c , se derivó la energía interna con respecto de la temperatura. Para calcular la energía interna se utilizó la forma general de la densidad de estados en dimensión arbitraria d , por lo que el salto del calor específico está generalizado a la dimensión d . Se encontró que el cociente $\Delta C/C_s$ depende de la densidad de estados, es decir de la dimensión del sistema, a diferencia del resultado obtenido por BCS. Utilizando la teoría CBE obtuvimos una expresión generalizada para $\Delta C/C_s$ (ecuación (49) en el Capítulo 3), válida para toda d y s , con s la potencia de la relación de dispersión.

Cuando $d = 3$ y $s = 1$, de la ecuación (49) se obtiene

$$\frac{\Delta C}{C_s} = 0.609. \quad (78)$$

Donde usamos los resultados $\zeta(3) = 1.2020569$, $\zeta(2) = 1.644934$ y $\zeta(4) = 1.0823232$. Por otro lado, como ya se mencionó, la teoría CBE toma en cuenta los pares de electrones en estados excitados, por lo que se introdujo en la relación de dispersión la energía de excitación mínima,

ϵ_g . Con esta nueva relación de dispersión se llegó a la siguiente forma de la discontinuidad del calor específico

$$\frac{\Delta C}{Nk_B} = \frac{(d/s)^2 \zeta(d/s)}{\zeta(d/s-1)} - (d/s-1) \frac{1}{k_B} \frac{d\epsilon_g}{dT} \Big|_{T_c} \quad (79)$$

y la forma para C_s en este caso es

$$\frac{C_s}{Nk_B} = \frac{d/s(d/s+1)\zeta(d/s+1)}{\zeta(d/s)} - (d/s-1) \frac{1}{k_B} \frac{d\epsilon_g}{dT} \Big|_{T_c}. \quad (80)$$

Fujita (ver capítulo 10 de Ref. [5]) encontró que $d\epsilon_g/dT|_{T_c} = -1.128k_B$. Usando las Ecs. (79) y (80) con $d = 3$ y $s = 1$ se obtiene

$$\frac{\Delta C}{Nk_B} = 8.832$$

y

$$\frac{C_s}{Nk_B} = 13.060;$$

esto implica que

$$\frac{\Delta C}{C_s} = 0.676. \quad (81)$$

Este valor es cercano a los resultados experimentales que se muestran en las tablas 2 y 3. El valor calculado por Fujita (ver pág. 226 de Ref. [5]), $\Delta C/C_s = 0.702$, está más lejos. Este alejamiento es debido a que Fujita no tomo en cuenta ϵ_g al calcular la energía interna, como se comentó al final del Capítulo 3.

En las tablas 2 y 3 se reproducen los valores experimentales de $\Delta C/C_s$ para varios materiales superconductores en dimensión 3. En la tabla 3 tenemos los materiales llamados superconductores convencionales. En estas tablas se incluyen las diferencias porcentuales, respecto a los datos experimentales, de $\Delta C/C_s$ obtenidos con las teorías BCS, BCS-Eliashberg [6] y CBE (con $\epsilon_g = 0$ y $\epsilon_g(T) \neq 0$, para este último se utilizó la forma propuesta por Fujita (ver Fig. 3.2) con $\epsilon_g(T_c) = 0$). La teoría de Eliashberg no se describe en el presente trabajo pero se incluyen sus calores específicos para efecto de comparación. En la tabla 3 vemos que las teorías que mejor se aproximan a los resultados experimentales son las de Eliashberg y CBE con $\epsilon_g = 0$,

sus promedios de error porcentual son 5.18 % y 5.41 % respectivamente. En la tabla 2 vemos que BCS y CBE con $\epsilon_g = 0$, se parecen mucho en sus errores porcentuales promedios los cuales son 37.3 % y 37.9 %, respectivamente. Los resultados teóricos que están más alejados de los resultados experimentales son los obtenidos con la teoría CBE con $\epsilon_g \neq 0$. En las tablas 2 y 3 reportamos errores porcentuales promedios 43.3 % y 12.11 %, respectivamente.

Tabla 2. Valores teóricos de $\Delta C/C_s$ comparados con datos experimentales para materiales en 3D. En la columna V. E., en esta tabla y en las posteriores, los números en paréntesis cuadrados indican la referencia experimental.

SUPERCONDUCTOR	V. E. [†]	BCS	CBE $\epsilon_g = 0$	CBE $\epsilon_g \neq 0$
3D	$\Delta C/C_s$	$\Delta C/C_s = 0.588$ % error*	$\Delta C/C_s = 0.609$ % error*	$\Delta C/C_s = 0.676$ % error*
Zr _{0.7} Ni _{0.3}	0.623 [15]	5.6	2.2	8.5
UPt ₃ (fp = fermión pesado)	0.474 [15]	24.0	28.4	42.6
URu ₂ Si ₂ (fp)	0.296 [15]	98.6	105.7	128.4
CeRu ₂ Si ₂ (fp)	0.778 [15]	24.4	21.7	13.1
BaPb _{1-x} Bi _x O ₃	0.889 [15]	33.9	31.5	24.0
		promedio 37.3 %	promedio 37.9 %	promedio 43.3 %

Símbolos utilizados en esta y las tablas siguientes:

[†]V. E. significa valor experimental

$$*\%error \equiv \left| \frac{(\text{valor experimental} - \text{valor calculado})}{\text{valor experimental}} \right| \times 100\%$$

Tabla 3. Comparación de los valores teóricos de $\Delta C/C_s$, obtenidos con diversas teorías, con datos experimentales para materiales superconductores convencionales en 3D.

SUPERCON DUCTOR 3D	V. E. [†] $\frac{\Delta C}{C_s}$	BCS	BCS- Eliashberg [6]		CBE $\epsilon_g = 0$	CBE $\epsilon_g \neq 0$
		$\frac{\Delta C}{C_s} = 0.588$ % error*	teoría	$\frac{\Delta C}{C_s}$ % error*	$\frac{\Delta C}{C_s} = 0.609$ % error*	$\frac{\Delta C}{C_s} = 0.676$ % error*
Hg	0.703 [16]	16.4	0.713	1.4	13.4	3.8
In	0.634 [16]	7.2	0.642	1.3	3.9	6.6
La (hcp)	0.600 [16]	2.0	0.681	13.5	1.5	12.7
Nb	0.659 [15]	10.8	0.660	0.1	7.6	2.6
Pb	0.730 [15]	19.4	0.735	0.7	16.6	7.4
Sn	0.615 [15]	4.4	0.627	1.9	1.0	9.9
Ta	0.614 [16]	4.2	0.620	0.4	0.8	10.1
Tl	0.600 [16]	2.0	0.635	5.8	1.5	12.7
V	0.598 [16]	1.7	0.620	3.7	1.8	13.0
Al	0.592 [15]	0.7	0.588	0.7	2.9	14.2
Ga	0.587 [16]	0.2	0.671	14.3	3.7	15.2
Mo	0.561 [16]	4.8	0.664	18.4	8.6	20.5
Cd	0.576 [15]	2.1			5.7	17.4
U(β)	0.590 [16]	0.3			3.2	14.6
Zn	0.559 [16]	5.2			8.9	20.9
		promedio 5.43 %		promedio 5.18 %	promedio 5.41 %	promedio 12.11 %

Cuando tenemos materiales bidimensionales, tomando el límite de momentos pequeños, es decir, aproximando el orden de la relación de dispersión igual a 1, de la Ec. (49) tenemos que

$$\frac{\Delta C}{C_s} = 0, \quad (82)$$

ya que $\zeta(1) \rightarrow \infty$. Ya se había mencionado en el Capítulo 3 que cuando $d/s \leq 2$ no había salto y $d = 2$ y $s = 1$ cumplen esta condición. Sin embargo, los experimentos muestran una discontinuidad distinta de cero (ver tabla 4). Si tomamos el “gap” de mínima excitación, de las Ecs. (79) y (80) tenemos que

$$\frac{\Delta C}{C_s} = 0.205. \quad (83)$$

lo cual es distinto de cero. En la tabla 4 se muestran valores experimentales para materiales de dimensión 2. Se encontró, al igual que en la tabla 2, el error porcentual tanto para la teoría CBE como para la teoría BCS cuyo valor teórico sigue siendo $\Delta C/C_s = 0.588$ ya que como se mencionó antes este resultado no depende de la dimensión.

Podemos observar claramente que los valores experimentales no cambian mucho, o simplemente no cambian, de un material en 3D a un material en 2D; por esto, como los resultados CBE cambian mucho al pasar de 3D a 2D, se alejan de los experimentos. También vemos que los valores experimentales de $\Delta C/C_s$ se parecen al salto BCS ya que en esta teoría $\Delta C/C_s$ tampoco cambia su valor al cambiar de 3D a 2D.

En el Capítulo 9 de la Ref. [5] se deduce la forma de C_V para toda temperatura en $d = 2$ y $s = 1$, el resultado se muestra en la Fig. 4.1. En esta gráfica vemos que en $T = T_c$, C_V tiene su valor máximo: $4.38 R$, con R la constante universal de los gases. También en esta figura vemos que para $T > T_c$ el calor específico tiende a bajar asintóticamente al valor de $2 R^+$.

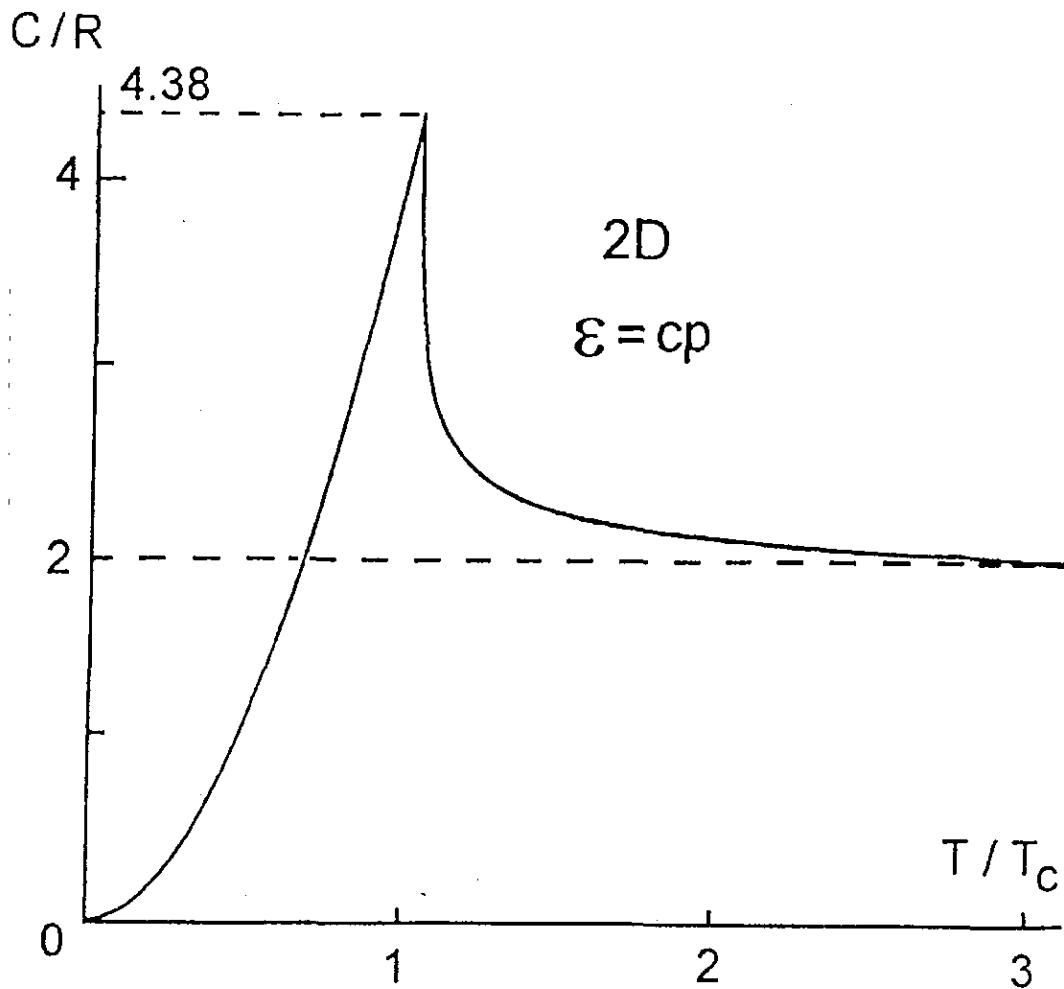


Figura 4.1. El calor específico C_V para bosones con una relación de dispersión lineal en un sistema de dos dimensiones. Cuando $T < T_c$ es proporcional a T^2 , llega a su valor máximo, $4.38 R$, en $T = T_c$ y después decrece a $2R$ en el límite de altas temperaturas. R es la constante del gas ideal (Fig. tomada de la pág. 186 de Ref. [5]).

Tabla 4. Comparación teoría-experimento de $\Delta C/C_s$ para materiales en 2D.

SUPERCONDUCTOR	$T_c(K)$	V. E.†	BCS	CBE ($\epsilon = 0$)		CBE ($\epsilon \neq 0$)
2D	exptl	$\Delta C/C_s$	$\Delta C/C_s$ = 0.588 % error*	$\Delta C/C_s$ ≥ 0.272 % error*	$\Delta C/C_s$ ≤ 0.543 % error*	$\Delta C/C_s$ = 0.205 % error*
$Tl_2Ba_2CaCu_2O_8$	110	≥ 0.74 [15]	≥ 20.5	≥ 63.2	≥ 26.6	≥ 72.3
$(TMTSF)_2ClO_4^{**}$	1.2	0.625 [15]	5.9	56.5	13.1	67.2
$YBa_2Cu_3O_7$	92	0.588 ± 0.003 [17]	0.0	53.7	7.6	65.1
$TlCaBaCu_2O_{5.5}$	114	≥ 0.592 [17]	≥ 0.7	≥ 54.0	≥ 8.3	≥ 65.4
$Bi_2Ca_2Sr_2Cu_4O_{11}$	95	≥ 0.585 [17]	≥ 0.5	≥ 53.5	≥ 7.2	≥ 65.0
$La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$	37	0.588 ± 0.009 [17]	0.0	53.7	7.6	65.1
$La_{1.85}Ba_{0.15}CuO_4$	34	0.588 [17]	0.0	53.7	7.6	65.1
$La_{1.85}Ca_{0.15}CuO_4$	20	0.590 [17]	0.3	53.9	8.0	65.2
$(Tl, Pb, Bi)_1(Sr, Ba)_2$ $Ca_2Cu_3O_9(Tl-1223)$		0.666 [18]	11.7	59.2	18.5	69.2
			promedio $\geq 4.4 \%$	promedio $\geq 55.8 \%$	promedio $\geq 11.6 \%$	promedio $\geq 66.6 \%$

**orgánico

Si nos imaginamos una discontinuidad de C_V su valor más grande que podría tener es la diferencia entre su valor en T_c y el valor asintótico cuando $T \rightarrow \infty$, es decir, el valor más grande en la discontinuidad del calor específico sería $2.38 R$. Proponemos como una cota inferior de esta discontinuidad la mitad del valor máximo: $1.19 R$. En este caso $C_s = 4.38 R$, entonces,

$$0.272 \leq \Delta C/C_s \leq 0.543. \quad (84)$$

En la tabla 4 observamos que para $\Delta C/C_s = 0.543$, la teoría CBE (con $\epsilon_g(T) = 0$) produce resultados que son consistentes con los datos experimentales, aunque no tanto como BCS.

Los valores experimentales de $\Delta C/C_s$ que sólo son señalados por una cota inferior en la tabla 4 se obtuvieron utilizando el campo magnético que suprime a la transición de fase superconductor (ver Ref. [17]).

Sean $C(0)$ y $C(H_s)$ los calores específicos en campos magnéticos 0 y H_s teslas respectivamente, donde H_s es el campo que suprime la transición de fase. Fijándonos en la Fig. 4.2, podemos darnos cuenta que la razón $[C(0) - C(H_s)]/T|_{T_c}$ puede ser una medida de $(C_s - C_n)/T_c$. Desafortunadamente la transición de fase como función de la temperatura no está bien localizada (en el caso de $\text{TlCaBaCu}_2\text{O}_{5.5}$ T_c está cerca de 115 K , ver Fig. 4.2) por lo que

$$(C_s - C_n)/T_c \geq \left[\frac{C(0) - C(H_s)}{T} \right]_{T_c}, \quad (85)$$

con $H_s = 7$ teslas cuando se trata de $\text{TlCaBaCu}_2\text{O}_{5.5}$ como se muestra en la Fig. 4.2.

En la Fig. 4.3 se grafica C_V/T como función de la temperatura para el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$.

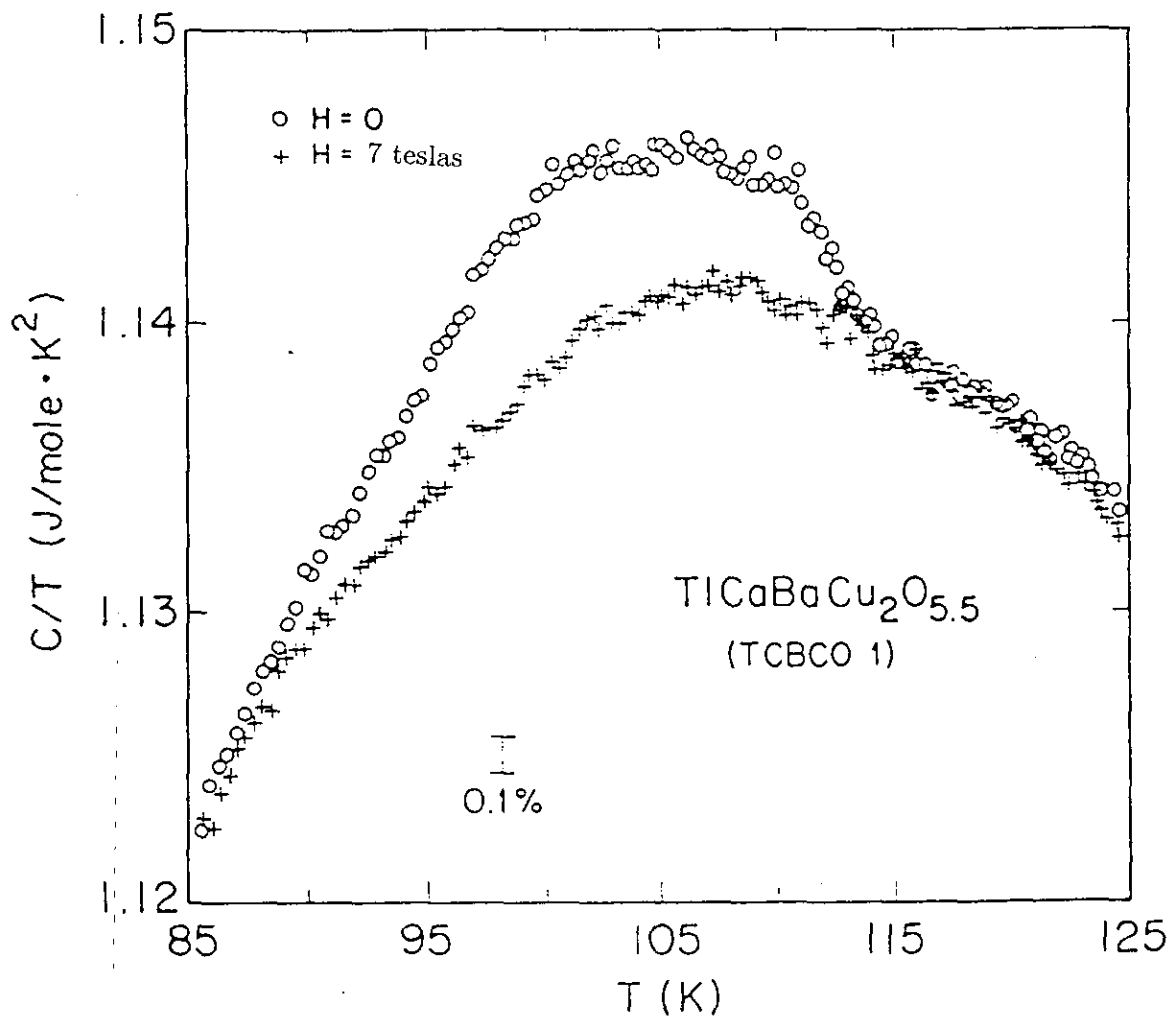


Figura 4.2. C_V/T vs. T para el TlCaBaCu $_2$ O $_{5.5}$ cerca de T_c a $H = 0$ y 7 teslas. Podemos apreciar que el campo magnético de 7 teslas suprime la transición de fase (ver [17]).

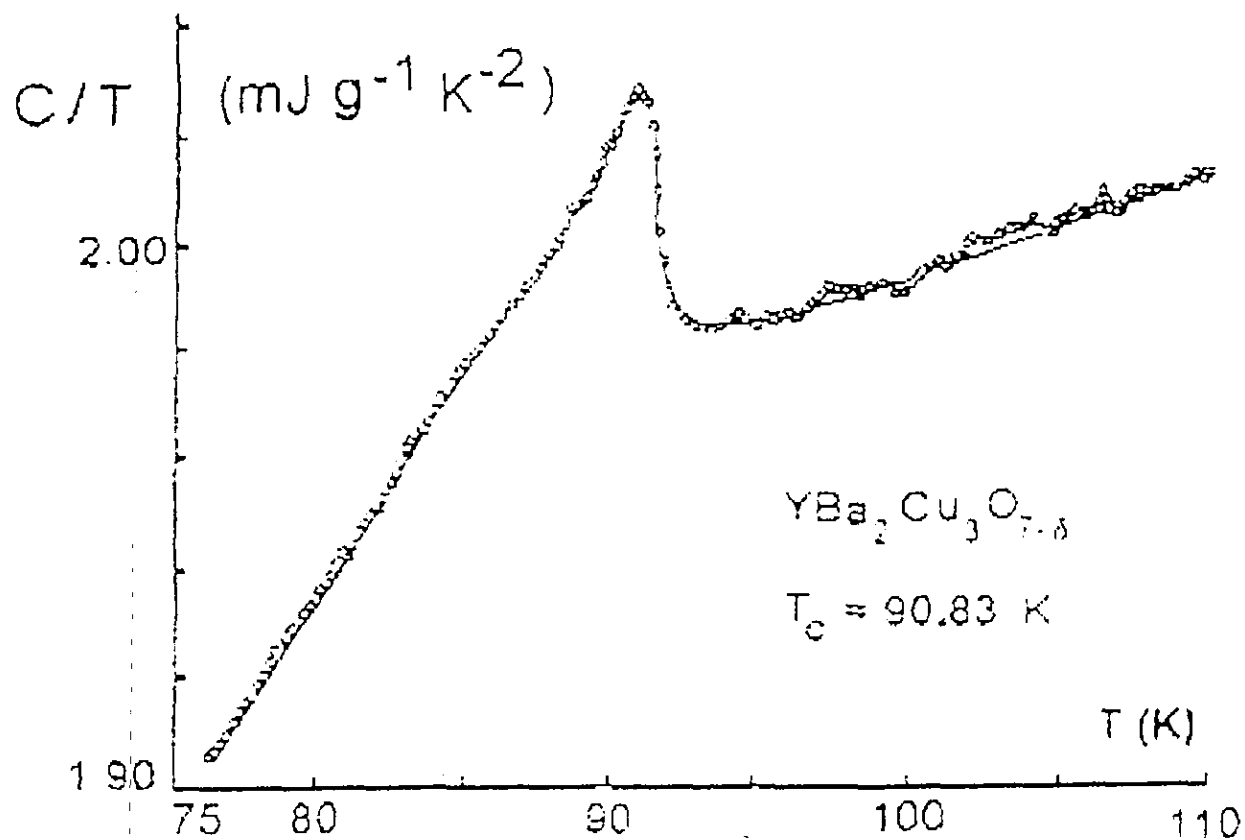


Figura 4.3. C_V/T vs. T para el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ para el cual $T_c = 90.83$ K (Fujita, comunicación personal).

Capítulo 5

Conclusiones

Toda teoría microscópica correcta que intente describir el fenómeno de la superconductividad deberá al menos reproducir teóricamente la discontinuidad del calor específico observada en los superconductores. En esta tesis calculamos dicha discontinuidad utilizando el concepto de cuasi-bosones (pares de Cooper) capaces de sufrir una CBE y que identificamos como el mecanismo de la superconductividad. Dichos bosones satisfacen una relación de dispersión lineal en cualquier dimensión espacial d .

Para los superconductores tridimensionales convencionales, el salto de calor específico calculado con la teoría CBE (con el “gap” bosónico de Fujita $\epsilon_g = 0$) se aproxima más a los resultados experimentales que el calculado con la teoría BCS. Con la teoría CBE se obtiene un error porcentual de 5.41 %, mismo que con la teoría BCS es de 5.43 %. La teoría de BCS-Eliashberg, proporciona un promedio de error porcentual del 5.18 % (ver tabla 3), el cual es más cercano al obtenido con la teoría CBE que con la teoría BCS.

Para otros superconductores también en 3D, pero con temperatura de transición alta, la teoría que más se aproxima a los resultados experimentales es la teoría BCS con un error porcentual de 37.3 %, mientras que el error porcentual de la teoría CBE es 37.9 % (ver tabla 2 del Capítulo 4). Sin embargo, debemos notar que tanto para el caso de los superconductores convencionales como los de altas T_c 's, los promedios de error porcentual predichos por ambas teorías son del mismo orden. Esto significa que la teoría de la condensación Bose-Einstein aunque incipiente podría en principio ser la teoría correcta que explique el fenómeno de la superconductividad de alta T_c , cuando se limpie de simplificaciones.

Con esta idea, en nuestros cálculos con la teoría BEC incluimos en la energía por bosón un “gap” ϵ_g , propuesto por Fujita (ver capítulo 10 de [5]), que separa el primer estado excitado

del par de Cooper del estado más bajo. Con la nueva relación de dispersión para los pares de Cooper se recalculó la discontinuidad del calor específico que resultó alejarse de los resultados experimentales (ver tablas 2, 3 y 4 del Capítulo 4).

No obstante, el introducir el “gap” de Fujita a la teoría BEC, nos condujo a predecir una discontinuidad del calor específico aun para dimensiones menores que tres, lo cual concuerda con lo observado experimentalmente (todos los materiales superconductores, aun los que se comportan como bidimensionales o unidimensionales, muestran una discontinuidad en el calor específico).

Tal vez una teoría más detallada de la condensación de Bose-Einstein con $\epsilon_g(T) \neq 0$, que excluya algunas de las aproximaciones con las que se trató aquí, como por ejemplo (i) el no considerar el efecto completo causado por el mar de Fermi (electrones no apareados), (ii) considerar los pares de Cooper como irrompibles, (iii) suponer un acoplamiento débil de los electrones de los pares de Cooper, (iv) considerar una relación de dispersión lineal, etc., podría conducirnos a una mejor coincidencia con los experimentos.

Por otro lado, la dependencia de la discontinuidad del calor específico con la dimensión espacial en la teoría CBE, hace que esta teoría difiera significativamente de los resultados experimentales en dimensiones diferente de 3. De las tablas del Capítulo 4 podemos darnos cuenta que la magnitud del salto experimental no depende de la dimensión, ya que en promedio no cambia al pasar de 3D a 2D. Cuando $\epsilon_g = 0$ tenemos que en 3D

$$\frac{\Delta C}{C_s} = 0.609 \quad (86)$$

y en 2D

$$\frac{\Delta C}{C_s} = 0. \quad (87)$$

Para $\epsilon_g \neq 0$ tenemos que en 3D

$$\frac{\Delta C}{C_s} = 0.676 \quad (88)$$

y en 2D

$$\frac{\Delta C}{C_s} = 0.205. \quad (89)$$

En cambio, la teoría BCS predice que este salto no depende de la dimensión por lo que concuerda en igual porcentaje con los resultados experimentales tanto en 3D como en 2D. Describir materiales con dimensiones distintas de 3D con la teoría CBE, conduce a una mala aproximación para los calores específicos en superconductores. Si sabemos que en realidad los materiales existen en tres dimensiones, aunque estén formados por planos atómicos o por cadenas de átomos, podríamos restringir su aplicabilidad a sólo 3D.

De lo anterior aún no podemos asegurar que una u otra teoría es la que verdaderamente “explica” la superconductividad, o siquiera el calor específico de los materiales superconductores. Desafortunadamente no hay suficiente evidencia experimental para hacer una comparación satisfactoria con las diversas teorías. Esto es porque el número de materiales superconductores en donde se ha medido el salto del calor específico es reducido. Sin embargo, no podemos detenernos a esperar a que aparezcan más materiales superconductores, y con estos más evidencias experimentales, para continuar con la teoría, sino que debemos llevar la teoría hasta sus últimas consecuencias, ya que uno de los objetivos de ésta es el predecir el comportamiento de más materiales para después ir a buscarlos al laboratorio.

Apéndice A

T_c según Gould *et al.* [12]

En este Apéndice se demuestra que la temperatura de transición deducida en la Ref. [12] es idéntica a la obtenida en esta tesis [ec. (34)]. También se muestra que ambos procedimientos para llegar a tal resultado son análogos.

Gould *et al.* definieron una energía ϵ_0 , la cual es la energía de Fermi para el caso en que se trate de fermiones o la energía de Debye para cuando se tengan fonones; ϵ_0 para otros sistemas es una conveniente energía de referencia. ϵ_0 está definida por

$$n \equiv \frac{N}{L^d} \equiv \int_0^{\epsilon_0} \rho(\epsilon) d\epsilon = n_s A_d (1/2\pi)^d (\epsilon_0/c_s)^{d/s}, \quad (90)$$

donde N es el número medio de partículas o para fonones es igual al número total de niveles de energía, el cual es el número de grados de libertad en la latiz. El número de grados de libertad es igual a d veces el número de átomos en la latiz, N_a . Así para fonones podemos interpretar N como dN_a . Se debe señalar que esta definición de n está restringida al caso cuando $T = 0$.

Para resolver (90) se utilizó

$$\rho(\epsilon) d\epsilon = n_s A_d (d/s) (1/2\pi)^d (\epsilon/c_s)^{d/s-1} d(\epsilon/c_s), \quad (91)$$

con n_s el número de espín o estado de polarización y $A_d \equiv \pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$. La $\rho(\epsilon)d\epsilon$ es el número de estados energéticos en el intervalo de energías de ϵ hasta $\epsilon + d\epsilon$, por unidad de volumen. Si escribimos ρ en función de k podemos obtener que

$$\rho(k) = n_s \frac{a(k)}{L^d},$$

$a(k)$ está dada por la ecuación (25). Por otro lado despejando ϵ_0 de la ecuación (90) tenemos

$$\epsilon_0 \equiv k_B T_0 = (\rho/n_s A_d)^{s/d} c_s (2\pi)^s. \quad (92)$$

Gould *et al.* introdujeron ϵ_0 para que todas las energías sean medidas en términos de ésta. Dividiendo las ϵ de (91) por ϵ_0 llegamos a

$$\rho(\tilde{\epsilon})d\tilde{\epsilon} = n \frac{d}{s} \tilde{\epsilon}^{d/s-1} d\tilde{\epsilon}.$$

Podemos eliminar la densidad de número n si multiplicamos esta última expresión para $\rho(\tilde{\epsilon})$ por L^d y la dividimos entre el número medio de partículas (o para fotones por grados de libertad), lo que se obtenga ya no va a ser la densidad de estados por unidad de volumen, sino que va a ser la densidad de estados por partícula (o para fotones por grado de libertad). Gould *et al.* denotaron esta densidad por $D(\tilde{\epsilon})$. Y está dada por

$$D(\tilde{\epsilon})d(\tilde{\epsilon}) \equiv (L^d/N)\rho(\tilde{\epsilon})d(\tilde{\epsilon}) = \frac{d}{s} \tilde{\epsilon}^{d/s-1} d\tilde{\epsilon}. \quad (93)$$

Enfatizando en que todas las energías están dadas en unidades de ϵ_0 , debemos estar concientes de que si vemos una energía de 1.5 esto en realidad corresponde a una energía de $1.5\epsilon_0$. Notemos que $T_0 = \epsilon_0/k_B$ es la temperatura de Fermi para fermiones y la temperatura de Debye para fonones. Para otros sistemas T_0 es solamente una conveniente temperatura de referencia. Gould *et al.* representan con el símbolo \tilde{T} a la temperatura en unidades de T_0 ; así $\tilde{T} = 2$ representa una temperatura de $2T_0$. Con estas unidades el autor nunca maneja k_B , \hbar , n_s , etc.

En estas condiciones Gould *et al.* llegan a que la temperatura crítica tiene la forma

$$\tilde{T}_c = \left[\frac{s/d}{I(1, -1, d/s - 1, \infty)} \right]^{s/d}.$$

Lo que queremos es demostrar que esta expresión es la misma que la expresión dada por (34), y así demostrar la equivalencia de la \tilde{T}_c según Gould *et al.* y la T_c según el método utilizado en [11]. Ayudándonos de

$$\int_0^\infty dx \frac{x^{n-1}}{z^{-1}e^x - 1} = \Gamma(n)g_n(z), \quad (94)$$

tenemos

$$\tilde{T}_c = \left[\frac{s/d}{\Gamma(d/s)g_{d/s}(1)} \right]^{s/d}, \quad (95)$$

recordemos que todas las temperaturas están en unidades de T_0 por lo que en realidad $T_c = \tilde{T}_c T_0$.

De la definición (92) para ϵ_0 se deduce que

$$T_0 = \frac{(n_B d \Gamma(d/2) / n_s 2\pi^{d/2})^{s/d} c_s (2\pi)^s}{k_B}, \quad (96)$$

aquí cambié n por n_B que es la que siempre se ha utilizado para la densidad de número de partículas bosónicas y sustituí A_d por su valor. Así

$$T_c = \frac{c_s}{k_B} \left[\frac{(s/d) d \Gamma(d/2) (2\pi)^d n_B}{n_s 2\pi^{d/2} \Gamma(d/s) g_{d/s}(1)} \right]^{s/d},$$

reordenando términos

$$T_c = \frac{c_s}{k_B} \left[\frac{s \Gamma(d/2) 2^{d-1} \pi^{d/2} n_B}{n_s \Gamma(d/s) g_{d/s}(1)} \right]^{s/d}, \quad (97)$$

la cual es idéntica a (34) excepto por el número de espín el cual no se tomó en cuenta en el primer cálculo de T_c . Ahora podemos darnos cuenta que el método utilizado por Gould *et al.* para deducir la T_c es el mismo que el que se menciona en el Capítulo 3. La diferencia radica en que Gould *et al.* encontraron una expresión para la temperatura generalizada a los casos de partículas bosónicas, fermiónicas y al límite clásico de Maxwell-Boltzmann, para al final reducir dicha expresión al caso de Bose-Einstein y meter las condiciones para obtener la temperatura de transición al estado condensado de Bose-Einstein.

Apéndice B

Condensación de Bose-Einstein en el espacio real

Algunos autores aseveran que la condensación Bose-Einstein (CBE) en el gas ideal (es decir, sin interacciones) de bosones es una condensación sólo en el espacio de momentos y no en el espacio real o de coordenadas como sería, por ejemplo, la condensación a un líquido de un vapor. Por ejemplo, **F. London** dice que “...one may say that there is actually a condensation, but only in momentum space, and not in ordinary space, i.e., an equilibrium of two phases, one containing the molecules N_0 of momentum zero and occupying in the space of moment, a zero volume; and another one showing a distribution over all momenta similar to that which is realized for $T > T_0$. In ordinary space, however, no separation of phases is to be noticed.” [19]. También el mismo autor habla de los bosones que “...settle in some kind of order in momentum space even at the expense of order in ordinary space.” [20]. Por otro lado, **Landau & Lifshitz** dicen: “The effect of concentrating the particles in the state $\epsilon = 0$ es often called ‘Bose-Einstein condensation’. We must emphasise that at best one might perhaps talk about ‘condensation in momentum space’. Actual condensation certainly does not take place in the gas.” [21]. Luego, **Fetter & Walecka** dicen: “...Below T_0 the occupation number n_0^0 of the lowest single-particle state is of order N , rather than of order 1. The assembly is ordered in momentum space and not in coordinate space; this phenomenon is called Bose-Einstein condensation.” [22]. **T. L. Hill** que “...As it is usually stated, the condensation occurs in momentum space rather than in coordinate space: the condensed phase consists of molecules with zero energy and momentum, and macroscopic de Broglie wavelength. (Actually a zero-point energy and momentum exist for a molecule in a box, but they are completely negligible in magnitude since V is macroscopic.)” [23]. **B. Maraviglia** “...La superfluidité découle du fait que les atomes d’hélium 4 qui obéissent à la statistique de Bose-Einstein peuvent se “condenser” non pas dans l’espace des positions mais dans celui des vitesses...” [24].

En contraste, autores como R. Becker [25], D.L. Goodstein [26] y D.A. McQuarrie [27] argumentan que la condensación toma lugar tanto en el espacio real como en el espacio de momentos:

R. Becker “...daß wir der kondensierten Phase, d. h. den $N^{(0)}$ -Atomen, kein bestimmtes Volumen zuschreiben können...” [25].

D. L. Goodstein “...The pressure thus goes as $T^{5/2}$, but (and here is the important point) it is independent of the volume...zero is the volume of the condensate...” [26].

D. A. McQuarrie ...Therefore the Bose-Einstein condensation is a first-order process. This is a very unusual first-order transition, however, since the condensed phase has no volume, and the system therefore has a uniform macroscopic density rather than the two different densities that are usually associated with first-order phase transitions. This is often interpreted by saying that the condensation occurs in momentum space rather than coordinate space, particularly since from a classical point of view, the particles in the condensed phase are found in the same region of momentum space, namely, zero momentum.” [27].

En este apéndice primero argumentamos que la condensación Bose-Einstein es una transición de fase de primer orden y luego que dicha condensación también se da en el espacio real.

Es importante mencionar que para que haya condensación BE en el espacio de coordenadas es necesario que el gas de bosones esté en su fase condensada en el espacio de momentos, es decir que el número total de bosones $N = N_0$, con N_0 el número de bosones en el estado de más baja energía del sistema. De lo contrario no podríamos tener todo el gas en un solo punto si los bosones se mueven en distintas direcciones a velocidades distintas entre sí. Si $N \neq N_0$ sólo la fracción condensada tendrá volumen cero. Por lo anterior, a $T = 0$, donde todos los bosones están condensados, el volumen total del gas de Bose es igual a cero.

Una transición de fase de primer orden es aquella en la que existe un calor latente. Dos

fases de la materia separadas por una transición de primer orden pueden coexistir en equilibrio termodinámico para un conjunto de parejas de las variables termodinámicas presión P y temperatura absoluta T , las cuales forman una curva en el plano $P - T$ conocida como la curva de coexistencia de fases. Ambas fases tienen la misma temperatura y presión pero difieren en entropía y en densidad.

Por otro lado, se puede demostrar [26] que el calor específico a presión constante C_P , y el calor específico a volumen constante C_V , están relacionados de la forma siguiente

$$C_P - C_V = TV K_T \left[\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \right]^2. \quad (98)$$

En la Fig. A.1 aparece la región de las dos fases (fase condensada coexistiendo con la fase normal). Un cambio en la temperatura T a volumen constante da como resultado cambios en la presión P tal que $(\partial P/\partial T)_V$ es finito. Sin embargo, la compresibilidad K_T , definida por

$$K_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T, \quad (99)$$

es infinita. Las isothermas en el plano $P - V$, mostradas en la Fig. A.1 son horizontales en la región de las dos fases. Así, según la ecuación (98), C_P es infinito cuando las fases coexisten ya que C_V no puede ser infinito. Es decir, en la región de las dos fases al absorberse calor a presión constante no hay cambios de temperatura. En otras palabras, tenemos un calor latente característico de la transición de fase de primer orden. Así podemos decir que la isoterma horizontal, la cual significa que una discontinuidad finita en V está presente a P y T constantes, es suficiente para identificar una transición de fase de primer orden.

Para demostrar que en un gas de Bose en realidad la isoterma del plano $P - V$ es horizontal en la región de las dos fases necesitamos conocer su ecuación de estado $P(T, V)$ en esta región y así poder juzgar el orden de la transición al condensado de Bose. Recordemos que para un gas ideal en tres dimensiones $PV = \frac{2}{3}U$, donde U es la energía interna. Si las partículas tienen una relación energía-momento (de dispersión) cuadrática. Para $T < T_c$, o bien $t \equiv T/T_c < 1$, $\mu = 0$

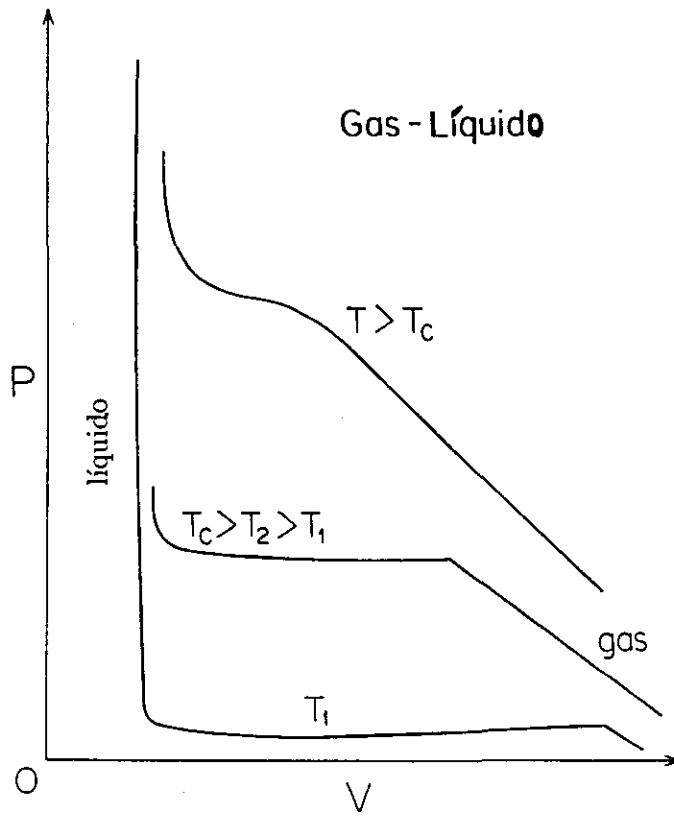


Figura A.1. Tres isothermas de van der Waals para un fluido clásico.

y la fugacidad $z = 1$, de modo que la energía interna (42) se vuelve

$$\frac{U(L^3, T)}{Nk_B T} = \frac{3}{2} \frac{g_{3/2+1}(1)}{g_{3/2}(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}, \quad (100)$$

por lo que,

$$P = \frac{2U}{3V} = \frac{g_{3/2+1}(1)}{g_{3/2}(1)} \frac{Nk_B T}{V} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}.$$

Sustituyendo (36) en la última expresión nos queda

$$P = 0.0852 \frac{m_B^{3/2}}{\hbar^3} (k_B T)^{5/2}, \quad (101)$$

donde hemos usado que $g_{5/2}(1) = 1.341$ y $g_{3/2}(1) = 2.612$. O sea, a temperatura constante, si cambiamos el volumen, la presión permanece constante. Este es el signo que indica que la condensación de Bose-Einstein es una transición de fase de primer orden. La compresibilidad es infinita y por tanto, de la ecuación (98) C_P es infinito.

Hágame ahora una descripción del gas degenerado de Bose como un sistema en el cual ocurre una transición de fase de primer orden. Cuando el sistema es degenerado, $\mu = 0$, decimos que consiste de dos fases en equilibrio: el condensado, el cual está compuesto por partículas en el estado de energía cero, y la parte excitada que podemos llamar "vapor de Bose." En un sistema clásico donde se encuentran en equilibrio el gas y el condensado, el gas tiene una entropía mucho más grande y ocupa un mayor volumen por partícula que el condensado. Pero el caso de Bose es un caso muy especial ya que el condensado tiene entropía cero y ocupa un volumen cero. El volumen cero es posible porque entre las partículas no hay interacciones repulsivas de corto alcance; o sea, las partículas son *puntuales*. Podemos ver que el condensado ocupa volumen cero por el siguiente argumento. Imaginemos el gas ideal de Bose en un cilindro con un pistón móvil. De acuerdo a la ecuación (101), si empujamos el pistón hacia adentro a temperatura constante, decrece el volumen y la presión no cambia. Esto mismo ocurriría si hacemos el mismo experimento con un sistema clásico de agua y vapor de agua, al disminuir su volumen el vapor es forzado a condensarse de tal manera que P y T permanecen constantes, como en el gas

de Bose. Pero en los sistemas clásicos la transición líquido-vapor termina cuando todo el vapor se ha convertido en líquido con un volumen menor pero distinto de cero y mostrando un rápido incremento en la presión. En nuestro gas de Bose podemos hundir el pistón a presión constante hasta que desaparezca la región de las dos fases, es decir, hasta que tengamos $N_0 = N$, igual que en el sistema real clásico. De (37) con $d = 3$ y $s = 2$ vemos que para tener $N = N_0$ necesitamos $T/T_c = 0$, o bien del hecho que $T_c = \text{cte}/V^{2/3}$ (ver ecuación (36))

$$\frac{TV^{2/3}}{\text{cte}} = 0. \quad (102)$$

Como estamos trabajando con isotermas a $T \neq 0$ vemos que la única solución para la ecuación anterior es $V = 0$.

Podríamos decir que hemos caído en una contradicción ya que al tener $N_0 = N$ estamos hablando necesariamente de un sistema a $T = 0$ y no de un sistema en la isoterma $T \neq 0$. Sin embargo debemos notar que conforme $N \rightarrow N_0$ por alguna $T \neq 0$, estamos acercándonos al final de la región de las dos fases donde todas las isotermas empiezan a confundirse, en particular, la isoterma con que empezamos y la isoterma a $T = 0$. En la Fig. A.2 vemos que lo que diferencia a las isotermas del gas de Bose de las isotermas del gas de van der Waals es que las primeras se “estrellan” con el eje de la presión en $V = 0$.

Se puede pensar que después de todo existe una importante diferencia entre la condensación de un vapor real clásico y la condensación de un vapor de Bose. Un vapor real clásico al condensarse en líquido se localiza físicamente en el fondo del contenedor, mientras que el vapor de Bose al condensarse la función de onda del sistema tiene amplitud constante en todo lugar dentro del contenedor: el vapor y el condensado están completamente interpenetrados. Sin embargo, en el sistema real clásico el hecho de que el condensado esté localizado en el fondo del contenedor es un efecto de la gravedad, una perturbación que no hemos considerado en nuestro modelo cuántico. En la ausencia de la gravedad, un líquido real clásico también tendría igual probabilidad de ser encontrado en cualquier lugar del receptáculo.

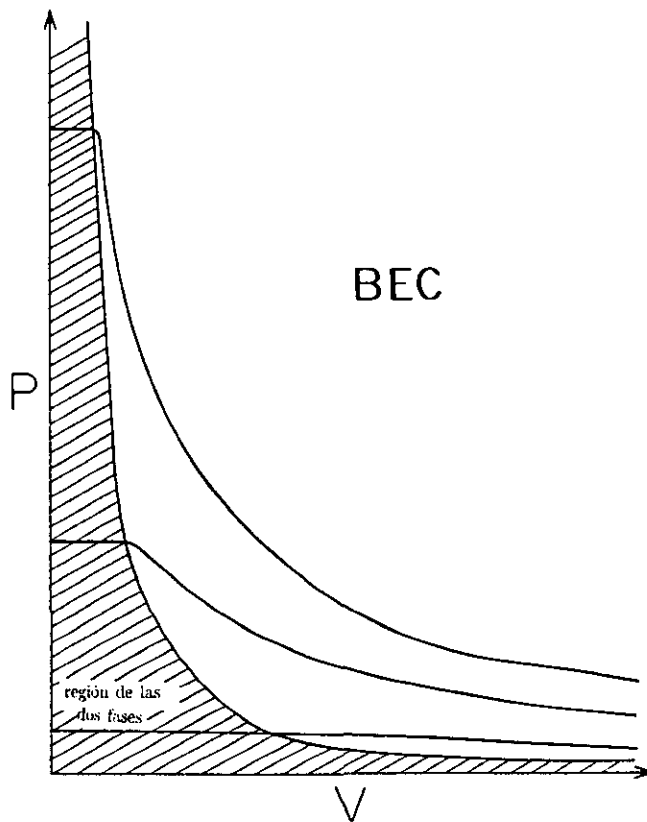


Figura A.2. Tres isotermas en el plano $P - V$ para un gas ideal de bosones.

Dado que las interacciones siempre están presentes en cualquier sistema real, la condensación de Bose en su forma pura nunca es observada en la naturaleza. No obstante, el comportamiento del gas degenerado de Bose puede ayudar a comprender un número de fenómenos reales, incluyendo la superconductividad y la superfluidez en sistemas de partículas neutras como el helio-3 líquido y el helio-4 líquido.

Referencias

- [1] M. Casas *et al.*, *Ciencia y Desarrollo* **129**, 42 (julio/agosto, 1996).
- [2] J. M. Williams *et al.*, *Science* **252**, 1501 (1991).
- [3] M. R. Schafroth *et al.*, *Helv. Phys. Acta* **30**, 93 (1957).
- [4] J. W. Rohlf, *Modern Physics from α to Z^0* (John Wiley & Sons, Inc., NY, 1994) págs. 403-38.
- [5] S. Fujita & S. Godoy, *Quantum Statistical Theory of Superconductivity* (Plenum, NY, 1996).
- [6] J. P. Carbotte, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 1076 (1990).
- [7] N. N. Bogoliubov, *Nuovo Cimento* **7**, 794 (1958).
- [8] J. G. Valatin, *Nuovo Cimento* **7**, 843 (1958).
- [9] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, 2a Ed. (McGraw-Hill, NY, 1996) pág. 43.
- [10] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, 2a Ed. (Pergamon, Oxford, 1996).
- [11] V. C. Aguilera-Navarro, M. de Llano & M. A. Solís, *Bose-Einstein condensation for general-dispersion-relation*, *Eur. J. Phys.* **20**, ? (1999).
- [12] H. Gould, L. Spornick & J. Tobochnik, *Thermal and Statistical Physics Simulations* (Wiley, NY, 1995) Cap. 6.
- [13] M. G. López Arrieta & M. A. Solís, *Nonzero total momenta Cooper pairs* (enviado a publicar).
- [14] M. Casas, S. Fujita, M. de Llano, A. Puente, A. Rigo & M. A. Solís, *Physica C* **245**, 93 (1998).

- [15] C. P. Poole, Jr., H. A. Farach & R. J. Creswick, *Superconductivity* (Academic, NY, 1995) pág. 94.
- [16] R. Meservey & B. B. Schwartz, *Superconductivity* (Ed. por R. D. Park) **Vol. I**, (Marcel Dekker, NY, 1969) pág. 165.
- [17] R. A. Fisher, J. E. Gordon & N. E. Phillips, *J. of Supercond.* **1**, 231 (1988).
- [18] G. Triscone, A. Junod & R. E. Gladyshevskii, *Physica C* **264**, 233 (1996).
- [19] F. London, *Phys. Rev.* **54**, 947 (1938).
- [20] F. London, *Superfluids*, Vol. II (Dover, NY, 1964) págs. 39, 143.
- [21] L. D. Landau & E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon, London, 1958) pág. 169.
- [22] A. L. Fetter & J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many Particles Systems* (McGraw-Hill, NY, 1971) pág. 44.
- [23] T. L. Hill, *An Introduction to Statistical Thermodynamics* (Addison-Wesley, London, 1960) pág. 452.
- [24] B. Maraviglia, *La Recherche* **2**, 142 (1971).
- [25] R. Becker, *Z. für Physik* **128**, 120 (1950).
- [26] D. L. Goodstein, *States of Matter* (Prentice-Hall, N J, 1975) pág. 132.
- [27] D. A. McQuarrie, *Statistical Mechanics* (Harper Collins, N Y, 1976) pág. 176.