

00382
7



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FISICAS

SUPERCONDUCTIVIDAD CON SIMETRIA d
EN EL MODELO DE HUBBARD

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)

P R E S E N T A :

LUIS ANTONIO PEREZ LOPEZ

ASESOR: DR. CHUMIN WANG CHEN



posgrado en ciencias físicas
unam

MEXICO, D. F.

2002

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.

A mis padres:

Blanca Luz y Luis Alfredo

A mis hermanos:

Blanca Andira y Carlos Alfredo

A:

Montserrat

AGRADECIMIENTOS

Agradezco al Dr. Chumin Wang Chen, por haber dirigido el trabajo de tesis, por el apoyo que me ha brindado, tanto en lo personal como en lo profesional, y sobre todo, por su amistad.

Al Dr. Rafael Ángel Barrio Paredes y al Dr. Alipio Gustavo Calles Martínez, miembros del comité tutorial y del jurado, por las sugerencias realizadas durante el desarrollo del trabajo de investigación, así como por su revisión cuidadosa y crítica del manuscrito.

A los profesores que integran el jurado: Dr. Rafael Baquero Parra, Dr. Mauricio Fortes Besprosvani, Dr. Oracio Navarro Chávez y Dr. Yuriy Rubo, por sus valiosos comentarios que contribuyeron a mejorar el trabajo escrito.

A la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA) y a la Dirección General de Estudios de Posgrado (DGEP) de la UNAM, por la Beca Nacional que me otorgaron para la realización de mis estudios doctorales.

Al CONACyT, a la DGAPA y a la DGEP, por el apoyo otorgado a través de los proyectos CONACyT-32148E, DGAPA-IN101701 y PAEP-Tesis Doctoral, respectivamente.

A la Dirección General de Servicios de Cómputo Académico (DGSCA), por permitir el uso del sistema Cray Origin 2000, donde parte de los cálculos presentados en esta tesis fueron realizados.

Al Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM, por todas las facilidades otorgadas durante mi estadía en él.

Quiero aprovechar la oportunidad para agradecer el apoyo y la amistad de: Elizabeth, Vicenta, Carmen, Rocío, Adrián, Emily, Román, Eloísa, Carlos, Yadira, Jelly, Fernando, Samuel, Raúl, Miguel y Estrella.

Deseo agradecer a toda mi familia por su cariño y apoyo, muy especialmente a mis padres a quienes amo, admiro y respeto. Por último, le agradezco a Monserrat por permitirme disfrutar la maravillosa experiencia que es compartir mi vida con ella.

Contenido

Introducción	2
1 Correlación Electrónica	5
1.1 Superconductores de alta T_c	5
1.2 Formalismo de segunda cuantización	9
1.3 Modelo de Hubbard	13
2 Teoría Microscópica de la Superconductividad	15
2.1 Formalismo de BCS a $T = 0$	17
2.2 Formalismo de BCS a $T \neq 0$	20
2.3 Hamiltoniano de Hubbard atractivo	24
3 Apareamiento de Huecos	26
3.1 Método del espacio de estados	27
3.2 Propiedades físicas de los pares	35
3.3 Análisis en el espacio recíproco	40
4 Pares con Simetría d	45
4.1 Interacción de carga-enlace a segundos vecinos	46
4.2 Diagramas de fase	48
4.3 Singuletes de huecos en un antiferromagneto	50
5 Superconductividad Anisotrópica	53
5.1 Simetría de la brecha superconductora	55
5.2 Ecuaciones BCS para el modelo de Hubbard	55
5.3 Estado superconductor con simetría d	58
Conclusiones	69
A Hamiltoniano de Hubbard en el Espacio Recíproco	71
B Solución Analítica en una Dimensión.	75
Referencias	80

Resumen

La superconductividad es quizás el fenómeno más fascinante de la física del estado sólido, puesto que ella constituye una manifestación macroscópica del comportamiento cuántico de la materia donde la correlación electrónica juega un papel fundamental. Hoy en día, se sabe que dicha correlación es de gran importancia en muchos fenómenos del sólido y sin embargo, ha habido poco avance significativo en su estudio, debido a las dificultades inherentes de resolver la ecuación de Schrödinger de muchos cuerpos. Un modelo general para describir sistemas de fermiones fuertemente correlacionados es el de Hubbard, el cual tiene la virtud de ser simple y enfatiza la correlación electrónica local. Pese a su simplicidad, únicamente se han encontrado soluciones exactas para sistemas de una e infinitas dimensiones. Para el resto de los sistemas, la mayoría de los resultados reportados han sido obtenidos a partir de soluciones numéricas en cúmulos pequeños de átomos, o usando una variedad de métodos aproximados.

En esta tesis se estudia el apareamiento electrónico en redes de una, dos y tres dimensiones así como la superconductividad en redes anisotrópicas dentro del modelo de Hubbard generalizado, en el cual se incluyen, además de las interacciones coulombianas en el mismo sitio (U) y entre sitios vecinos (V), interacciones de carga-enlace a primeros (Δt) y segundos (Δt_3) vecinos. Se demuestra que estas dos últimas interacciones rompen la simetría electrón-hueco, favoreciendo la formación de pares de huecos sin necesidad de interacciones densidad-densidad atractivas. El problema de dos partículas interactuando a través del modelo de Hubbard generalizado se ha mapeado a un problema de una sola partícula descrito por un modelo de amarre fuerte con impurezas, tanto de sitio como de enlace, en un espacio de mayor dimensión. Los estados de dos partículas se analizan de forma exacta a través de su energía de amarre, longitud de coherencia y masa efectiva. La interacción de carga-enlace a primeros vecinos permite la formación de singuletes de huecos con simetría s anisotrópica y los resultados muestran un incremento del apareamiento alrededor de $\Delta t = 0.5|t_0|$, aún cuando las interacciones repulsivas U y V son muy grandes, siendo t_0 el parámetro de salto a primeros vecinos. Asimismo, los diagramas de fase calculados en redes lineales, cuadradas, triangulares y cúbicas muestran que las regiones de apareamiento se incrementan al disminuir la dimensionalidad del sistema.

Por otra parte, se demuestra por vez primera que la interacción de carga-enlace a segundos vecinos es fundamental para la formación de singuletes de huecos con simetría $d_{x^2-y^2}$ en sistemas bidimensionales, a pesar de su magnitud relativamente pequeña en comparación con las demás interacciones que incluye el hamiltoniano de Hubbard generalizado. La extensión de este estudio a densidades finitas de huecos dentro del formalismo de BCS muestra que Δt_3 estabiliza el estado base superconductor con simetría $d_{x^2-y^2}$ en un intervalo amplio de concentraciones de huecos, en comparación con el estado superconductor con simetría s y el estado de separación de fase, este último ha sido un gran obstáculo para el estado superconductor cuando éste se origina a partir de una interacción densidad-densidad atractiva a primeros vecinos. Se ha analizado el cociente entre la brecha de excitación y la temperatura crítica, encontrándose que éste se incrementa cuando la densidad de huecos disminuye, en concordancia con las observaciones experimentales en los

cupratos superconductores. Además, la teoría predice que podría haber una rotación de la brecha de excitación con simetría d como función del ángulo polar cuando varía la densidad de huecos, como sugieren algunos experimentos de tunelaje. Finalmente, se encuentra que el acoplamiento interplanar podría debilitar la superconductividad.

Introducción

La mecánica cuántica aplicada al estudio de la materia condensada tuvo uno de sus mayores logros al formular la teoría de bandas, la cual ha podido explicar muchas propiedades de los sólidos, entre ellas la diferencia de más de treinta órdenes de magnitud que existe entre la conductividad eléctrica de un metal, de un semiconductor y de un aislante (Kittel, 1996). Esta teoría está basada en el modelo del electrón independiente, en el que se supone que el movimiento de un electrón es estadísticamente independiente de los demás y la interacción electrón-electrón es reemplazada por un potencial promedio mediante la aproximación de campo medio (Marder, 2000). Sin embargo, dicho modelo no permite describir fenómenos tales como la superconductividad, el efecto Hall cuántico fraccionario y el magnetismo itinerante, en los que es necesario considerar de manera explícita la correlación entre electrones. En el caso de la superconductividad, la teoría microscópica de Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) formulada en 1957, logró explicar dicho fenómeno en casi todos los materiales conocidos hasta entonces, al postular una interacción atractiva electrón-electrón mediada por fonones, la cual permite la formación de un condensado de pares de electrones por debajo de una temperatura crítica T_c (Bardeen, *et al.*, 1957). El descubrimiento de los cupratos superconductores (Bednorz y Müller, 1986), en los que la correlación electrónica de corto alcance juega un papel fundamental, motivó un renovado interés por reexaminar el origen de la superconductividad, ya que las altas temperaturas críticas observadas en estos materiales sugieren que el mecanismo de apareamiento podría ser de origen electrónico (Anderson, 1987).

Un modelo general expresado en términos de interacciones locales que permite estudiar la correlación electrónica en sólidos es el modelo de Hubbard (Hubbard, 1963). Este modelo ha sido aplicado exitosamente para describir la transición metal-aislante o transición de Mott-Hubbard (Imada, *et al.*, 1998), el magnetismo itinerante (Anderson, 1963), así como las ondas de densidad de carga y de espín (Peierls, 1955). Asimismo, desde el descubrimiento de los cupratos superconductores de alta T_c , el hamiltoniano de Hubbard ha sido objeto de intenso estudio debido a su énfasis en la correlación electrónica local que está directamente relacionada con la longitud de coherencia pequeña observada en estos materiales (Mícnas, *et al.*, 1990). Aunque han pasado más de 15 años desde el descubrimiento de dichos materiales, aún se desconoce el mecanismo físico que da origen a la formación de pares. Desde el punto de vista experimental, hoy en día ya existe consenso en muchas de sus características, tales como la formación de pares de huecos en un estado singulete, una longitud de coherencia del orden de unos cuantos parámetros de red ($\sim 10\text{\AA}$) así como una concentración baja de portadores ($\sim 10^{21}\text{cm}^{-3}$), en comparación con los metales conductores tradicionales (Poole, *et al.*, 1995). Además, todos estos materiales poseen planos de cobre-oxígeno (CuO_2) y existe evidencia experimental de que la superconductividad se origina básicamente en estos planos (Tsuei y Kirtley, 2000). Para describir la dinámica de los electrones y de los huecos en los planos CuO_2 de estos materiales se han propuesto modelos de Hubbard de tres bandas (Dagotto, 1994a). Estos modelos pueden reducirse a modelos efectivos de una sola banda (Zhang y Rice, 1988; Schüttler y Fedro, 1992; Simón, *et al.*, 1997) y los estados electrónicos cercanos al nivel de Fermi pueden describirse razonablemente bien por un modelo de amarre fuerte

bidimensional con saltos a primeros y segundos vecinos. Actualmente, se acepta que el modelo de Hubbard de una sola banda es un punto de partida apropiado para describir las correlaciones electrónicas en los planos CuO_2 (Dagotto, 1994a).

A pesar de su gran popularidad, el modelo de Hubbard solamente ha podido resolverse de forma exacta para los sistemas de una dimensión (Lieb y Wu, 1968) y de dimensión infinita (Metzner y Vollhardt, 1989). Sin embargo, para dimensiones intermedias no existe solución exacta en forma general. Dentro de este campo de investigación destaca el estudio de la formación local de pares que es relevante para explicar no solamente las propiedades no convencionales en los cupratos superconductores (Micnas, *et al.*, 1988, 1990; Blaer, *et al.*, 1997), sino también fenómenos tales como la existencia de ondas de densidad de carga en sistemas con bandas angostas (Micnas, *et al.*, 1984), la conductividad en polímeros (Chung, *et al.*, 1984) y la superconductividad debida a fermiones pesados (Kusunose, *et al.*, 2000; Fujimoto, 2001), por mencionar algunas. En esta tesis presentamos una solución exacta del modelo de Hubbard generalizado para dos partículas en redes de una, dos y tres dimensiones (Pérez y Wang, 1998a). Dicho modelo incluye un término de salto asistido o correlacionado (Δt) entre primeros vecinos el cual rompe la simetría electrón-hueco y favorece la formación local de pares de huecos sin necesidad de exigir interacciones densidad-densidad atractivas (Pérez y Wang, 1998b). Asimismo, se realiza un análisis detallado de la dinámica de dichos pares (Pérez y Wang, 1999).

Por otra parte, la simetría de los pares de Cooper en los superconductores de alta T_c ha sido un tópico de intenso estudio. Se ha establecido experimentalmente que la simetría de apareamiento es tipo d en un gran número de cupratos superconductores (Tsuei y Kirtley, 2000). Sin embargo, se ha demostrado que la superconductividad con simetría d es incompatible con el modelo de Hubbard estándar (Su, 1998) mientras que los modelos de Hubbard generalizados que incluyen únicamente interacciones de carga-enlace a primeros vecinos, conducen sólo a superconductividad con simetría s anisotrópica (Hirsch, 1989; 2000). Por otro lado, extensiones del modelo de Hubbard que incluyen interacciones de tres cuerpos (Arrachea, *et al.* 1999) y modelos que incluyen una interacción densidad-densidad atractiva entre primeros vecinos (Nazarenko, *et al.*, 1996) podrían producir superconductividad con simetría d . Desafortunadamente, en este modelo de Hubbard atractivo el estado de separación de fase inhibe la formación del estado base superconductor, conforme el valor de la interacción atractiva se incrementa. En la presente tesis, consideramos un hamiltoniano de Hubbard generalizado que incluye explícitamente el término de interacción de carga-enlace (Δt_3) a segundos vecinos que usualmente se desprecia por su magnitud pequeña en comparación con las interacciones coulombianas directas. Se demuestra que su participación es crucial en la formación de pares de huecos con simetría $d_{x^2-y^2}$ (Pérez y Wang, 2001). Asimismo, hemos extendido el estudio al caso de densidades finitas de huecos para investigar la superconductividad con simetría $d_{x^2-y^2}$ dentro del formalismo BCS (Pérez y Wang, 2002a).

La tesis está organizada de la siguiente forma: En el primer capítulo se revisan los hechos experimentales de los materiales superconductores de alta T_c , algunos conceptos básicos de la teoría cuántica de muchos cuerpos y se introduce el modelo de Hubbard generalizado. En el segundo capítulo se hace una breve revisión de la teoría microscópica de la superconductividad (teoría BCS) y su aplicación al modelo de Hubbard. En el tercer capítulo se realiza un estudio detallado de la formación local de pares por medio de la interacción de carga-enlace a primeros vecinos. El

estudio se lleva a cabo en redes de una, dos y tres dimensiones y se analizan las propiedades físicas de dichos pares mediante una extensión del método del espacio de estados. Además se presentan diagramas de fase para las redes lineal, cuadrada, triangular y cúbica. En el cuarto capítulo se analiza la formación de pares con simetría $d_{x^2-y^2}$ a partir de un hamiltoniano de Hubbard generalizado bidimensional que incluye un término de interacción de carga-enlace a segundos vecinos. En el capítulo cinco se realiza un estudio de los estados superconductores con simetría $d_{x^2-y^2}$ en sistemas anisotrópicos por medio del hamiltoniano de Hubbard generalizado dentro del formalismo BCS. Finalmente, se da un resumen de los resultados más importantes y conclusiones principales de la tesis.

Capítulo 1

Correlación Electrónica

El descubrimiento de los cupratos superconductores con altas T_c impulsó a gran escala el estudio de sistemas fermiónicos fuertemente correlacionados en los que la interacción electrón-electrón de corto alcance juega un papel fundamental (Anderson, 1987). El modelo de Hubbard es adecuado para estudiar esta correlación de corto alcance, ya que éste está expresado en términos de interacciones locales y no depende explícitamente de la naturaleza de éstas. En este capítulo se revisan brevemente las características principales de los superconductores de alta T_c , el formalismo de segunda cuantización que simplifica la descripción de sistemas cuánticos de muchas partículas, y finalmente se introduce el modelo de Hubbard generalizado.

1.1 Superconductores de alta T_c

Las aplicaciones a gran escala de los superconductores, en especial para el transporte de energía eléctrica a grandes distancias, se han visto aplazadas por la necesidad de enfriar estos materiales por debajo de una T_c para que alcancen el estado superconductor. En los superconductores convencionales las temperaturas críticas son muy bajas por lo que se requiere helio líquido como refrigerante, lo cual implica un alto costo. Cuando en 1986, Bednorz y Müller reportaron superconductividad con una T_c de aproximadamente 30K en el sistema $La - Ba - Cu - O$, se desencadenó una investigación efervescente en todo el mundo con el principal objetivo de encontrar temperaturas de transición cada vez más altas en este tipo de materiales. En los siguientes seis años varias familias de óxidos superconductores fueron descubiertas, las cuales incluyen el sistema $YBaCuO$ (Wu, *et al.*, 1987) que posee una $T_c \approx 90K$, así como los sistemas basados en mercurio con temperaturas de transición que llegan a alcanzar los 160K bajo presión (Chu, *et al.*, 1993). Durante este período alrededor de 15,000 artículos sobre superconductividad de alta T_c fueron publicados (Ginzburg, 2000), haciendo evidente que este fenómeno ha sido visto por muchos científicos como uno de los temas de mayor interés de la física en la última década del siglo pasado. Muchas son las razones por las que existe un extraordinario interés por estos materiales, entre ellas podemos citar el interés científico por entender el mecanismo físico que da origen a su superconductividad, las aplicaciones potenciales de estos materiales así como la posibilidad de encontrar un superconductor a temperatura ambiente.

Hasta la fecha, se han sintetizado decenas de cupratos superconductores. Todos ellos son compuestos que contienen cuatro o más elementos ordenados en celdas unitarias básicamente tetragonales. Un ejemplo de ellas se muestra en la figura 1.1(a). Asimismo, todos los cupratos superconductores consisten de uno o más planos de

CuO_2 emparejados entre reservorios de carga formados por $La-O$, $Ba-O$, $Bi-O$, $Tl-O$, o $Hg-O$ por citar algunos ejemplos. En los planos de CuO_2 cada ión de cobre está fuertemente amarrado a cuatro iones de oxígeno separados por una distancia de aproximadamente 1.9 \AA [ver figura 1.1(b)]. Entre los planos de CuO_2 y los reservorios de carga, ocurre una transferencia de carga en la que algunos electrones son removidos de los planos CuO_2 . De manera equivalente se habla de *dopaje* por huecos de dichos planos. Este dopaje es uno de los principales parámetros experimentales que determinan las propiedades físicas de los óxidos superconductores. Consideremos a manera de ejemplo el aislante La_2CuO_4 , a partir del cual se deriva la familia de superconductores $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. En este caso, los planos de CuO_2 presentan un orden antiferromagnético y no tienen ninguna característica metálica. Si se añade Sr al compuesto, algunos electrones son removidos de estos planos, dejando vacancias o huecos en la banda de más alta energía. Por ejemplo, sustituyendo una concentración x de La trivalente por Sr divalente se inducen x huecos por celda de CuO_2 . Con el dopaje los planos se convierten en conductores y eventualmente el material superconduce con una T_c que depende fuertemente de la concentración de huecos. Cabe señalar que las concentraciones de portadores en estos materiales son de uno a dos órdenes de magnitud menores que la de los metales típicos (Poole, *et al.*, 1995).

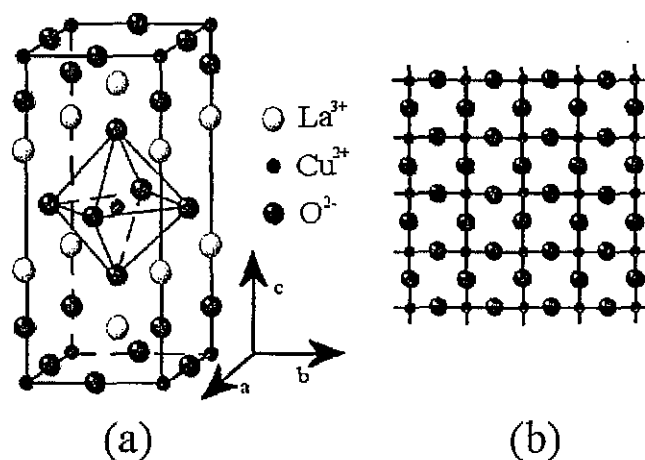


Figura 1.1. (a) Estructura cristalina del compuesto La_2CuO_4 del cual se deriva la familia de superconductores $La_{2-x}Sr_xCuO_4$. (b) Esquema de los planos CuO_2 .

En la figura 1.2 se muestra un diagrama de fase cualitativo de los cupratos superconductores en las variables de temperatura (T) y dopaje por huecos (x) de los planos de CuO_2 . Para $x = 0$ se tiene un aislante antiferromagnético de Mott con temperaturas de Néel en un intervalo de $250 - 400K$ dependiendo del material (Orenstein, *et al.*, 2000). Dicha temperatura decae rápidamente con x llegando a cero en $x_c \approx 0.02$ en el sistema $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, por ejemplo [figura 1.2(a)]. Para niveles de dopaje superiores a x_c varias formas de magnetismo local o inconmensurado sobreviven y a niveles inter-

medios las propiedades dinámicas del material pueden caracterizarse como un vidrio de espines [figura 1.2(b)]. Cuando x crece el sistema entra, a bajas temperaturas, a una fase superconductor [figura 1.2(d)] con una brecha superconductor con simetría $d_{x^2-y^2}$ en la mayoría de los cupratos. La concentración de portadores (x_0) a la cual se tiene la máxima temperatura crítica se conoce como *dopaje óptimo* y es del orden de $x_0 \approx 0.2$. Los compuestos con concentraciones mayores y menores que x_0 se conocen como materiales de alto y bajo dopaje, respectivamente. Por otra parte, la región de pseudobrecha [figura 1.2(c)] que aparece debajo de una temperatura $T^*(x)$ se caracteriza por exhibir un rápido decaimiento de la susceptibilidad de espín (Timusk, 1999), lo cual es señal de la existencia de una brecha de espín. La resistencia eléctrica en la dirección de los planos en el estado normal alrededor de x_0 [figura 1.2(e)] muestra una dependencia lineal con la temperatura (Maple, 1998) contrario a lo que se esperaría en un metal normal. Asimismo, en esta región la conductividad eléctrica en función de la frecuencia ω decrece como ω^{-1} (Batlogg, 1998), en vez de ω^{-2} como ocurre en los metales normales (Mahan, 1990; Sánchez, *et al.*, 2001). Finalmente, en la región de muy alto dopaje [figura 1.2(f)] estos materiales presentan un comportamiento metálico normal.

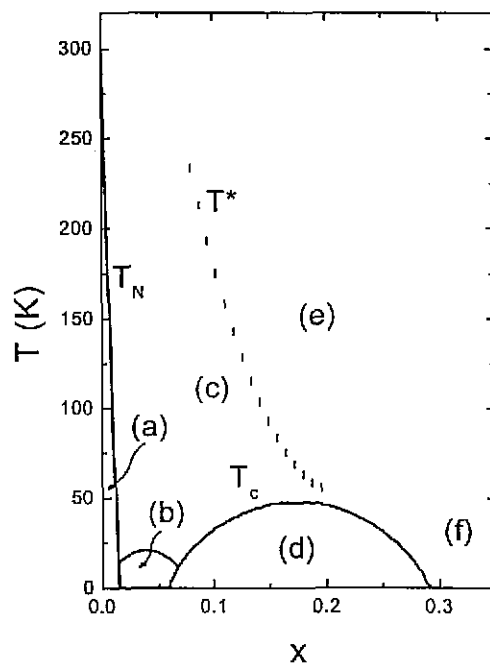


Figura 1.2. Diagrama de fase genérico de los cupratos superconductores (Maple, 1998).

Por otra parte, los experimentos de tunelaje Josephson (Keene *et al.*, 1989) y de cuantización de flujo magnético (Gough *et al.*, 1987) muestran que el estado superconductor está formado por pares de partículas en un estado de espín singulete. También se observa un salto en el calor específico a $T = T_c$, lo cual indica que la transición de fase es de segundo orden. Las longitudes de coherencia (ξ) en los cupratos su-

perconductores son del orden de $10^{-8}cm$ a diferencia de las que se observan en los superconductores convencionales, que son del orden de $10^{-4}cm$. Asimismo, en los superconductores convencionales la función de onda del par tiene simetría s o esférica mientras que, en la mayoría de los cupratos superconductores, dicha función de onda tiene simetría $d_{x^2-y^2}$ (Tsuei y Kirtley, 2000).

Una vez analizada la estructura y el diagrama de fase de los superconductores de alta T_c , el siguiente paso consiste en escribir un modelo que describa el comportamiento electrónico de estos materiales. Debido a la complejidad de su estructura es necesario hacer algunas simplificaciones. Para empezar, es razonable construir un hamiltoniano restringido a los electrones que se mueven en los planos de cobre y oxígeno. Por supuesto, hay algunas características del diagrama de fase que sólo pueden explicarse añadiendo un acoplamiento entre planos, tal es el caso de la existencia de una temperatura crítica de Néel finita, y se espera que este tipo de detalles puedan estudiarse una vez que la física en los planos sea entendida. Sin embargo, aún bajo estas suposiciones el problema de los electrones en los planos de CuO_2 sigue siendo difícil de analizar ya que los iones de cobre Cu^{2+} tienen nueve electrones distribuidos en cinco orbitales d , mientras que los iones de oxígeno O^{2-} tienen tres orbitales p ocupados. En particular, dentro de los cupratos superconductores la degeneración entre orbitales d se rompe por el campo cristalino local quedando un orbital *antibonding* de mayor energía del tipo $d_{x^2-y^2}p\sigma$, con una mayor contribución del orbital d (Fulde, 1991). Este orbital es de particular importancia ya que es el que está parcialmente ocupado por un solo electrón, y es origen de muchas de las propiedades físicas del sistema. De esta manera, en ausencia de dopaje el material está bien descrito por un modelo de espines $1/2$ localizados, cuya interacción de superintercambio da a estos materiales su carácter antiferromagnético (Dagotto, 1994).

Si ahora se añade otro hueco por dopaje, la fuerte repulsión coulombiana (U_d) entre estos dos huecos provoca un desdoblamiento grande de dicho orbital *antibonding*, es decir, se forma una brecha energética de Hubbard que rompe la degeneración de espín en dicho orbital. Se estima que la magnitud de dicha brecha es del orden de $U_d \sim 10eV$ (Hybertsen, *et al.*, 1990), por lo que la energía de Fermi del sistema cruza la banda formada por el segundo orbital híbrido más energético que tiene una mayor contribución de los orbitales p . En otras palabras, el hueco adicional se localiza principalmente en los orbitales p del oxígeno (Dagotto, 1994). Como consecuencia, la interacción de superintercambio es afectada por la presencia de los huecos adicionales y el orden antiferromagnético es debilitado, conduciendo a la existencia de vidrios de espines, como se ve en la figura 1.2.

La dinámica de electrones en el plano CuO_2 puede describirse correctamente por un modelo de Hubbard de tres orbitales que son p_x y p_y del oxígeno y $d_{x^2-y^2}$ del cobre, como se muestra en la figura 1.3 (a) (Emery, 1987; Littlewood, *et al.*, 1989). Los parámetros de este modelo son estimados por cálculos del tipo funcionales de la densidad dentro de la aproximación de densidad local (Andersen, *et al.*, 1995). Además, estos cálculos sugieren que el modelo de Hubbard de tres bandas puede reducirse al de

una sola banda (Hybertsen, *et al.*, 1990; Zhang y Rice, 1988; Schüttler y Fedro, 1992; Simón, *et al.*, 1997) considerando únicamente la que cruza la energía de Fermi, como se aprecia en la figura 1.3 (b) (Entel y Zielinsky, 1990). Una descripción adecuada de la superficie de Fermi mostrada en el recuadro de la figura 1.3 (b), requiere que el modelo de Hubbard de una sola banda, que introduciremos formalmente en la sección 1.3, incluya saltos a primeros y segundos vecinos (Yu, *et al.*, 1988; Andersen, *et al.*, 1995).

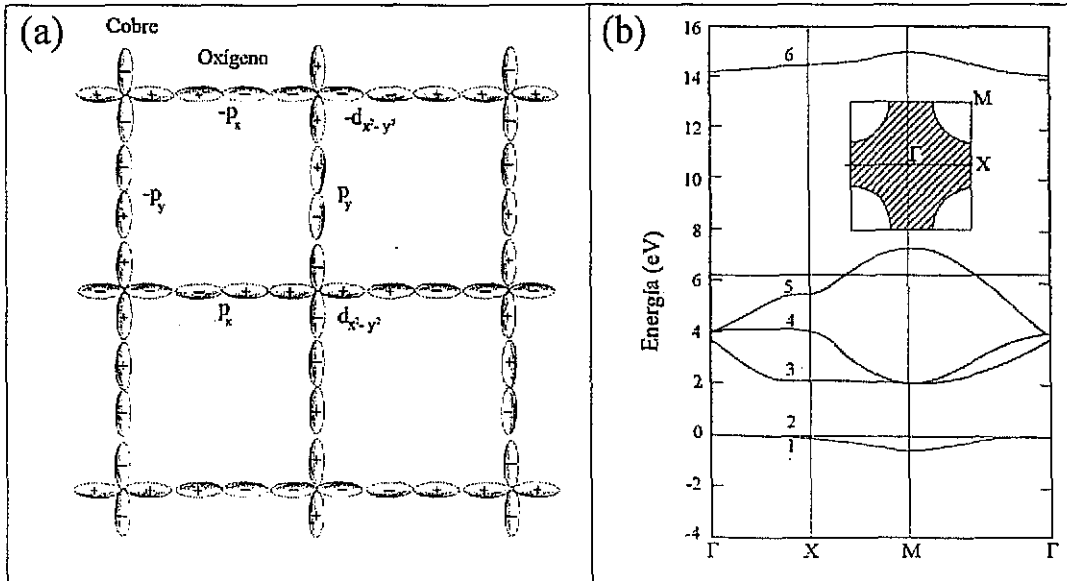


Figura 1.3. (a) Orbitales usados en el modelo de tres bandas de los planos de CuO_2 . Cada cobre contribuye con un orbital $d_{x^2-y^2}$ y cada oxígeno contribuye con p_x o p_y . La convención de signos para los orbitales se muestra en la figura. (b) Estructura de bandas para el modelo de Hubbard de tres orbitales con un llenado de 4.5 electrones por celda unitaria. Para este llenado, la energía de Fermi cruza la banda 5 que tiene una mayor contribución de los orbitales p . El desdoblamiento a seis bandas se debe al rompimiento de la degeneración de espín por la repulsión coulombiana U_d . En el recuadro se muestra la superficie de Fermi para este llenado (Entel y Zielinsky, 1990).

1.2 Formalismo de segunda cuantización

El formalismo de segunda cuantización reformula la ecuación de Schrödinger de muchos cuerpos con la ventaja de que los operadores en esta representación incorporan la estadística de las partículas (bosones o fermiones), simplificando el estudio de sistemas de muchas partículas idénticas que interactúan entre sí. En esta sección revisaremos brevemente la técnica de segunda cuantización para fermiones y más adelante usaremos estos resultados para establecer el hamiltoniano de Hubbard. Comencemos por considerar un conjunto completo ortonormal de funciones de onda de una sola partícula $\varphi_{\epsilon_j}(\zeta)$ donde ϵ_j denota el estado de una sola partícula mientras que la variable ζ representa todas las coordenadas de la partícula, incluyendo las coordenadas espaciales

y la componente z del espín. Ahora considérese un conjunto de fermiones independientes en el que cada partícula está en alguno de los estados φ_{ε_j} y sea n_j el número de partículas en dicho estado (n_j puede ser 0 o 1). Las cantidades n_j son los llamados números de ocupación y constituyen las variables fundamentales del formalismo de segunda cuantización, en vez de las coordenadas de las partículas. Una función de onda para un sistema de N fermiones no interactuantes debe construirse como un producto antisimétrico de funciones de onda de una sola partícula. Tales funciones antisimétricas bajo el intercambio de las coordenadas de dos fermiones, se expresan como determinantes de Slater

$$\Phi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{\varepsilon_1}(\zeta_1) & \dots & \varphi_{\varepsilon_1}(\zeta_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{\varepsilon_N}(\zeta_1) & \dots & \varphi_{\varepsilon_N}(\zeta_N) \end{vmatrix}. \quad (1.1)$$

En el esquema de los números de ocupación, la función anterior suele denotarse por $|n_1, n_2, \dots, \rangle$. Con el fin de que no exista ambigüedad en el signo algebraico, se debe establecer un orden en los índices ε_j , de tal forma que ε_1 siempre aparezca antes que ε_2 , etc. Nótese que dos estados no pueden tener los mismos números cuánticos ε_j , ni las coordenadas de dos partículas pueden ser iguales ya que en ambos casos la función de onda se anula (Principio de Exclusión de Pauli). El factor $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ en la ecuación (1.1) asegura que Φ está normalizada. Asimismo, todas las funciones con diferencias en los estados de una sola partícula son ortogonales a (1.1). De esta manera, cualquier función de onda de un sistema de N fermiones Ψ puede expresarse como una combinación lineal de funciones Φ (Fetter y Walecka, 1971). Por esta razón es necesario determinar el efecto de operadores cuánticos sobre dichas funciones. En general, el hamiltoniano de un sistema de N partículas interactuantes puede escribirse como

$$H = \sum_{i=1}^N h(\zeta_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N v(\zeta_i, \zeta_j). \quad (1.2)$$

Este hamiltoniano está formado por operadores de una sola partícula y operadores de dos partículas. El primero es un operador $h(\zeta)$ que solamente depende de las coordenadas de una sola partícula, sin embargo, al considerar sistemas de N partículas idénticas siempre encontramos sumas de tales operadores, iguales entre sí excepto por la coordenada. Aquí entenderemos por operador de una sola partícula H_1 a la suma de los operadores $h(\zeta_i)$

$$H_1 = \sum_{i=1}^N h(\zeta_i). \quad (1.3)$$

Análogamente, un operador de dos partículas H_2 se referirá a una suma de operadores

$v(\zeta_i, \zeta_j)$ que dependen de las coordenadas de un par de partículas

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N v(\zeta_i, \zeta_j). \quad (1.4)$$

En esta suma se incluyen todos los pares distintos y se excluye el término $v(\zeta_i, \zeta_i)$ ya que suponemos que una partícula no interactúa consigo misma. En la base de las funciones (1.1), los elementos de matriz de H_1 serán cero a menos que todos los números de ocupación permanezcan inalterados o bien, los estados difieran en un solo número de ocupación. Para el segundo caso se puede demostrar que, para $i < j$,

$$\langle \dots, n_i = 1, \dots, n_j = 0, \dots | H_1 | \dots, n_i = 0, \dots, n_j = 1, \dots \rangle = h_{ij} (-1)^{S(i+1, j-1)}, \quad (1.5)$$

donde

$$h_{ij} \equiv \langle i | h | j \rangle \equiv \int \varphi_i^*(\zeta) h(\zeta) \varphi_j(\zeta) d\zeta, \quad (1.6)$$

y la integración incluye una suma sobre las coordenadas de espín. En (1.5), $S(i+1, j-1)$ es la suma de los números de ocupación desde $i+1$ (incluyendo este estado) hasta $j-1$. En general,

$$S(m, n) \equiv \sum_{k=m}^n n_k. \quad (1.7)$$

Si $i > j$, el exponente en (1.5) es $S(j+1, i-j)$. Nótese que siempre contamos el número de estados ocupados entre el estado con menor índice y el estado con mayor índice. La cantidad S especifica el número de permutaciones de los renglones ϵ_k requeridas para que los determinantes (1.1) tengan todos los renglones iguales excepto por el que es afectado por el operador $h(\zeta_i)$. Asimismo, los elementos de matriz diagonales de H_1 son simplemente

$$\langle \dots, n_k, \dots | H_1 | \dots, n_k, \dots \rangle = \sum_k h_{kk} n_k. \quad (1.8)$$

Con el fin de simplificar el álgebra y facilitar el seguimiento de los signos, se introducen en el espacio de Hilbert generado por los vectores $|n_1, \dots, n_\infty\rangle$, los operadores c_j que remueven el renglón j del determinante (1.1) y que satisfacen la siguiente regla

$$c_j |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\rangle = \delta_{1, n_j} (-1)^{S(1, j-1)} |n_1, n_2, \dots, n_j - 1, \dots\rangle. \quad (1.9)$$

Este operador, conocido como operador de aniquilación para el estado j , no es hermitiano y es sencillo ver que su adjunto cumple

$$c_j^+ |n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\rangle = \delta_{0, n_j} (-1)^{S(1, j-1)} |n_1, n_2, \dots, n_j + 1, \dots\rangle. \quad (1.10)$$

Nótese que este último operador agrega una partícula al estado j si ninguna estaba presente inicialmente, es por lo tanto, un operador de creación. Usando las relaciones (1.9) y (1.10) podemos verificar que, para $i < j$

$$\langle \dots, n_i = 1, \dots, n_j = 0, \dots | c_i^+ c_j | \dots, n_i = 0, \dots, n_j = 1, \dots \rangle = (-1)^{S(i+1, j-1)}, \quad (1.11)$$

mientras que si consideramos los operadores en orden opuesto, el estado ε_i está presente cuando c_j actúa y un signo negativo adicional es obtenido

$$\langle \dots, n_i = 1, \dots, n_j = 0, \dots | c_j c_i^+ | \dots, n_i = 0, \dots, n_j = 1, \dots \rangle = -(-1)^{S(i+1, j-1)}. \quad (1.12)$$

Finalmente, para el caso $i = j$, es fácil comprobar que

$$\langle \dots, n_i, \dots | c_i^+ c_i | \dots, n_i, \dots \rangle = n_i \quad (1.13)$$

y

$$\langle \dots, n_i, \dots | c_i c_i^+ | \dots, n_i, \dots \rangle = 1 - n_i. \quad (1.14)$$

Todas estas relaciones pueden resumirse en las siguientes reglas de anticonmutación para los operadores fermiónicos de creación y aniquilación

$$\{c_i, c_j^+\} \equiv c_i c_j^+ + c_j^+ c_i = \delta_{ij}, \quad \{c_i, c_j\} = \{c_i^+, c_j^+\} = 0. \quad (1.15)$$

El operador $c_i^+ c_i$ se conoce como operador de número y sus eigenvectores son los estados $|n_1, n_2, \dots, \rangle$ con eigenvalores n_j . Comparando (1.11) y (1.5), es claro que el operador H_1 puede expresarse como

$$H_1 = \sum_{i,j} \langle i | h | j \rangle c_i^+ c_j. \quad (1.16)$$

Los resultados para el operador H_2 son similares y resulta que (Marder, 2000)

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij | v | kl \rangle c_i^+ c_j^+ c_l c_k, \quad (1.17)$$

en donde el elemento de matriz $\langle ij | v | kl \rangle$ está dado por

$$\langle ij | v | kl \rangle = \int \varphi_{\varepsilon_i}^*(\zeta_1) \varphi_{\varepsilon_j}^*(\zeta_2) v(\zeta_1, \zeta_2) \varphi_{\varepsilon_k}(\zeta_1) \varphi_{\varepsilon_l}(\zeta_2) d\zeta_1 d\zeta_2. \quad (1.18)$$

Es importante hacer notar que el orden de los operadores (i, j, k, l) en la ecuación (1.17) es distinto del que aparece en los elementos de matriz (i, j, l, k) . De esta manera, el hamiltoniano más general de un sistema de N partículas interactuantes puede es-

cribirse, dentro del formalismo de segunda cuantización, como

$$H = H_1 + H_2 = \sum_{i,j} \langle i | h | j \rangle c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij | v | kl \rangle c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k. \quad (1.19)$$

1.3 Modelo de Hubbard

Uno de los modelos más simples y generales, expresado en términos de interacciones locales, usado para describir los aspectos de muchos cuerpos en las propiedades electrónicas de los sólidos es el modelo de Hubbard (Hubbard, 1963) que a continuación derivamos.

Para mantener la teoría lo más simple posible consideraremos un sólido con una sola banda electrónica s . Como estamos interesados en una descripción local del sistema, es conveniente trabajar en la base de las funciones de Wannier, las cuales se obtienen a partir de las funciones de Bloch mediante una transformada de Fourier (Ashcroft y Mermin, 1976). Si denotamos por $|i\rangle$ al estado de un electrón descrito por la función de Wannier $\varphi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)$ centrada en el sitio \mathbf{R}_i e introducimos los operadores de creación $c_{i,\sigma}^\dagger$ y de aniquilación $c_{i,\sigma}$ para un electrón con espín σ en el estado $|i\rangle$, podemos reescribir el hamiltoniano de la ec. (1.19) como

$$H = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + \sum_{i,j \neq i,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} U_{ij}^{kl} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'}^\dagger c_{l,\sigma'} c_{k,\sigma}. \quad (1.20)$$

donde

$$t_{ij} \equiv \langle i | h | j \rangle = \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i) h(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j), \quad \varepsilon_i \equiv t_{ii}, \quad (1.21)$$

y

$$U_{ij}^{kl} \equiv \langle ij | v | kl \rangle = \int d^3r d^3r' \varphi^*(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i) \varphi^*(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_j) v(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_k) \varphi(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_l). \quad (1.22)$$

Aquí $h(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u(\mathbf{r})$, donde $u(\mathbf{r})$ es el potencial que siente un electrón debido a todos los iones y $v(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = e^2/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ como la interacción Coulombiana de largo alcance entre dos electrones. En adelante sólo se considerarán los términos U_{ij}^{kl} más importantes en la ecuación (1.20). Por ejemplo, para sistemas de bandas angostas, Hubbard mostró que los elementos de matriz dominantes de la interacción electrón-electrón son

$$\begin{aligned} U &= \langle ii | v | ii \rangle \\ V &= \langle ij | v | ij \rangle \quad \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j \text{ primeros vecinos} \\ \Delta t &= \langle ii | v | ij \rangle \quad \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j \text{ primeros vecinos} \end{aligned} \quad (1.23)$$

De esta manera, U y V parametrizan la interacción de dos electrones situados en un mismo sitio y en sitios vecinos, respectivamente, y Δt es una interacción de carga-enlace, la cual puede verse como un término de salto entre primeros vecinos dependiente de la densidad. Este término incrementa la amplitud de salto cuando al menos uno de los dos orbitales o sitios involucrados en el proceso está ocupado por otra partícula. Ciertamente estas interacciones siempre están presentes en un sólido real aunque sus contribuciones pueden ser muy diferentes. Por ejemplo, para los electrones en la banda $3d$ de los metales de transición U , V , y Δt , son típicamente del orden de 20, 3, y $0.5eV$, respectivamente (Hubbard, 1963). Considerando únicamente estos elementos de matriz del potencial de interacción v , y despreciando los demás términos, se obtiene el siguiente hamiltoniano de Hubbard generalizado

$$H = -t_0 \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} (n_{i,-\sigma} + n_{j,-\sigma}), \quad (1.24)$$

donde $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma}$ es el operador de número, y la ocupación electrónica total en el sitio i es $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$. El símbolo $\langle i,j \rangle$ indica que la suma se extiende únicamente sobre los primeros vecinos. Asimismo, $t_{i,j} = -t_0 < 0$, para i,j primeros vecinos y por simplicidad hemos escogido $\varepsilon_i = 0$. En general, si v en la ecuación (1.23) representa la repulsión Coulombiana se tiene que $U, V, \Delta t \geq 0$. Para $\Delta t = 0$, este hamiltoniano se reduce al así llamado modelo de Hubbard *extendido*, el cual es útil para estudiar, por ejemplo, la competencia entre ondas de densidad de espín y ondas de densidad de carga (Hirsch, 1984). Asimismo, si $V = \Delta t = 0$, se obtiene el famoso modelo de Hubbard estándar (Hubbard, 1963).

Cuando se realiza una transformación electrón-hueco en la Ec. (1.24), es decir, los operadores de electrones son mapeados a operadores de huecos por medio de $c_{i,\sigma}^+ \rightarrow h_{i,\sigma}$ ($c_{i,\sigma} \rightarrow h_{i,\sigma}^+$), el hamiltoniano se transforma en

$$\begin{aligned} H = & (U + 2ZV)(N_s - \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma}^h) + (t_0 - 2\Delta t) \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^+ h_{j,\sigma} \\ & + U \sum_i n_{i,\uparrow}^h n_{i,\downarrow}^h + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i^h n_j^h \\ & + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^+ h_{j,\sigma} (n_{i,-\sigma}^h + n_{j,-\sigma}^h), \end{aligned} \quad (1.25)$$

donde N_s es el número total de sitios y Z es el número de coordinación de la red. El primer término en la ecuación (1.25) solamente contribuye a un corrimiento en la energía total y por consiguiente los huecos también interaccionan por medio de un modelo de Hubbard generalizado pero con parámetro de hopping efectivo $t = t_0 - 2\Delta t$, en vez de $-t_0$ para electrones.

Capítulo 2

Teoría Microscópica de la Superconductividad

El fenómeno de la superconductividad fue descubierto en 1911 por H. Kamerlingh Onnes en Leiden, Holanda, tres años después de que logró licuar el helio por primera vez, permitiendo así experimentar con temperaturas muy bajas. Lo que él encontró fue que la resistencia eléctrica de algunos metales, tales como el plomo, el mercurio y el aluminio, desaparecía completamente en un intervalo muy pequeño de temperaturas alrededor de una temperatura crítica (típicamente unos cuantos grados Kelvin) específica de cada metal. En 1933, Meissner y Ochsenfeld descubrieron que estos superconductores eran también diamagnetos perfectos (“efecto Meissner”). Estas propiedades fueron descritas por la teoría fenomenológica de F. y H. London en 1935. En su modelo postularon una densidad de “electrones superconductores” n_S por unidad de volumen, cuya respuesta a un campo electromagnético puede describirse por

$$\mathbf{J}_S = -\frac{c}{4\pi\lambda_L^2}\mathbf{A}, \quad (2.1)$$

donde \mathbf{A} es el potencial vectorial del campo electromagnético, el cual satisface una norma específica (norma de London). La derivada temporal de la ecuación (2.1) implica que los electrones superconductores responden a un campo eléctrico \mathbf{E} esencialmente como electrones libres de Drude con un tiempo de relajación infinito. El rotacional de la ecuación (2.1) junto con las ecuaciones de Maxwell, conduce a $\nabla^2\mathbf{B} = \mathbf{B}/\lambda_L^2$. Esto implica que el campo magnético \mathbf{B} es exponencialmente apantallado en el interior de una muestra superconductora en una longitud de penetración dada por

$$\lambda_L = \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi n_S e^2}}. \quad (2.2)$$

Ginzburg y Landau (1950) extendieron la teoría fenomenológica de London, basándose en la teoría de transiciones de fase de segundo orden creada por Landau. Ellos introdujeron como parámetro de orden, la función de onda compleja de los electrones superconductores, $\Psi(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|e^{i\varphi(\mathbf{r})}$, tal que $n_S \propto |\Psi(\mathbf{r})|^2$. Su teoría reproduce la ecuación (2.1) de una forma que resulta ser invariante de norma

$$\mathbf{J}_S = 2e|\Psi(\mathbf{r})|^2\mathbf{v}_S, \quad (2.3)$$

donde $m^*\mathbf{v}_S = \hbar\nabla\varphi(\mathbf{r}) - 2e\mathbf{A}/c$, con m^* la masa efectiva. Asimismo, se mostró

que $\Psi(\mathbf{r})$ está gobernada por una ecuación diferencial no lineal, de tal forma que $\Psi(\mathbf{r})$ podía variar con la posición y el valor del campo, además de la dependencia en la temperatura de n_S . Cabe mencionar que la teoría de Ginzburg y Landau aún sigue siendo el punto de partida para resolver problemas que contemplan un estado superconductor con variaciones espaciales.

El descubrimiento del efecto isotópico, esto es, que $T_c \propto M^{-\alpha}$ donde M es la masa de los iones y $\alpha \approx 0.5$, dio soporte a la idea de que la superconductividad es el resultado de la interacción electrón-fonón. Antes de este descubrimiento, Frölich había trabajado en un modelo basado en esta interacción pero no logró describir las propiedades de un superconductor. Más tarde, Cooper demostró que el estado normal de un mar de Fermi de electrones es inestable bajo cualquier interacción atractiva entre dos electrones, sin importar cuán débil sea ésta (Cooper, 1956). Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS), estudiaron entonces un hamiltoniano reducido (Bardeen, *et al.*, 1957) que incluye interacciones que involucran solamente pares de electrones con espines y momentos opuestos. Su teoría microscópica constituye un notable éxito de la teoría cuántica de los sólidos ya que explica de manera simple, aunque no trivial, los principales efectos de la superconductividad. Como veremos más adelante, esta teoría predice una brecha de energía en el espectro de excitaciones lo cual implica el efecto Meissner y la electrodinámica no local de los superconductores. Asimismo, la teoría predice una transición de fase de segundo orden a una T_c dada por

$$k_B T_c = \hbar \omega_0 e^{\frac{-1}{D(E_F)V}}, \quad (2.4)$$

con una brecha de energía que se va a cero en T_c como $(T_c - T)^{1/2}$. En la ecuación anterior $\hbar \omega_0$ es energía media de un fonón, V es la interacción efectiva electrón-electrón y $D(E_F)$ es la densidad de estados por espín en el nivel de Fermi. Para superconductores con acoplamiento débil ($D(E_F)V \ll 1$) la teoría predice que

$$\frac{2\Delta_0}{k_B T_c} = 3.52, \quad (2.5)$$

donde Δ_0 es la energía mínima de excitación de una quasipartícula. También predice que el flujo magnético atrapado en un anillo superconductor es un número entero de $\Phi_0 = hc/2e$, reflejando el hecho de que el condensado superconductor está formado por pares de electrones. En 1958, Gor'kov sugirió la formulación de campo cuántica de la teoría BCS utilizando $\Delta_{\mathbf{k}}$ como parámetro de orden de largo alcance "fuera de la diagonal". Incluyendo variaciones espaciales en la brecha superconductora $\Delta(\mathbf{r})$, pudo derivar la teoría fenomenológica de Ginzburg-Landau a partir de la teoría BCS. Los efectos de interacciones fuertes fueron explicados por Eliashberg al extender las ecuaciones de Gor'kov para incluir efectos retardados en la interacción de apareamiento.

La investigación en materiales superconductores recibió un nuevo impulso con el descubrimiento de Bednorz y Müller en 1986 de compuestos cerámicos con tempe-

raturas de transición que eventualmente superaron la temperatura del nitrógeno líquido ($77K$) alcanzando los $133K$ para el compuesto $HgBa_2Ca_2Cu_3O_8$ (Putilin, *et al.*, 1993; Schilling, *et al.*, 1993). Esta T_c puede incrementarse hasta $164K$, si dicho compuesto se somete a presiones del orden de $30GPa$ (Chu, *et al.*, 1993). Las altas temperaturas críticas así como los valores pequeños de α hallados en estos materiales, sugieren que el mecanismo fonónico no es necesariamente el origen del apareamiento en los cupratos superconductores y que dicho mecanismo podría ser de origen electrónico (Anderson, 1987). Sin embargo, cabe señalar que dentro del formalismo de Eliashberg existen argumentos que impiden descartar por completo al mecanismo fonónico (Carbotte, 1990). Aunque hasta la fecha no existe consenso sobre el mecanismo que da lugar a la formación de pares en los superconductores cerámicos, el origen de dicha interacción no es crucial para que el formalismo BCS se sostenga, por lo que las ideas generales de esta teoría no están del todo excluidas como una posible explicación de la superconductividad en estos materiales.

2.1 Formalismo de BCS a $T = 0$

En esta sección obtendremos la ecuación para la brecha superconductor así como la energía del estado base superconductor a temperatura cero por medio del método variacional. Partiremos del llamado hamiltoniano reducido que incluye las interacciones que involucran solamente pares de electrones con espines y momentos opuestos

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^+ c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \downarrow}, \quad (2.6)$$

suponiendo que este hamiltoniano incluye todos los términos relevantes para la superconductividad. Aquí, $\varepsilon(\mathbf{k})$ es la energía de una sola partícula, $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ es el elemento de matriz del potencial de interacción entre dos electrones y N_s es el número de celdas unitarias del sólido. La teoría BCS propone para el estado base superconductor una función de prueba variacional de la siguiente forma (Bardeen, *et al.*, 1957)

$$|\Psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^+) |0\rangle, \quad (2.7)$$

donde $v_{\mathbf{k}}$, $u_{\mathbf{k}}$, son las amplitudes de probabilidad de encontrar al estado $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$ ocupado y desocupado, respectivamente, y por lo tanto $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ (condición de normalización). Esta función de onda no es eigenfunción del operador de número total \hat{N} , es decir, representa un estado con un número de partículas variable. Para determinar el valor medio del número de partículas N , debemos minimizar con respecto a $v_{\mathbf{k}}$ el

valor de expectación $\langle \Psi_G | H_{BCS} - \mu \hat{N} | \Psi_G \rangle$, es decir,

$$\delta \langle \Psi_G | H - \mu N | \Psi_G \rangle = \delta \left[2 \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \right] = 0, \quad (2.8)$$

donde μ es el potencial químico. Resulta conveniente definir $h_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}^2$ y $\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$, por lo que podemos escribir

$$\langle \Psi_G | H - \mu N | \Psi_G \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) h_{\mathbf{k}} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sqrt{h_{\mathbf{k}} (1 - h_{\mathbf{k}}) h_{\mathbf{k}'} (1 - h_{\mathbf{k}'})}. \quad (2.9)$$

La minimización de $\langle \Psi_G | H - \mu N | \Psi_G \rangle$ con respecto a $h_{\mathbf{k}}$ conduce a

$$\frac{\partial \langle \Psi_G | H - \mu N | \Psi_G \rangle}{\partial h_{\mathbf{k}}} = 0 = 2 \xi(\mathbf{k}) + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sqrt{h_{\mathbf{k}'} (1 - h_{\mathbf{k}'})} \frac{(1 - 2h_{\mathbf{k}})}{\sqrt{h_{\mathbf{k}} (1 - h_{\mathbf{k}})}}. \quad (2.10)$$

Definiendo

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sqrt{h_{\mathbf{k}'} (1 - h_{\mathbf{k}'})}, \quad (2.11)$$

podemos escribir (2.10) de la siguiente forma

$$2 \xi(\mathbf{k}) = \Delta_{\mathbf{k}} \frac{1 - 2h_{\mathbf{k}}}{\sqrt{h_{\mathbf{k}} (1 - h_{\mathbf{k}})}}. \quad (2.12)$$

De esta última ecuación, $h_{\mathbf{k}}$ resulta ser

$$h_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right), \quad (2.13)$$

donde $E(\mathbf{k})$ está dado por

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}. \quad (2.14)$$

En consecuencia obtenemos que

$$v_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right)} \quad \text{y} \quad u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right)}. \quad (2.15)$$

La ecuación (2.11) tiene la forma de una condición de autoconsistencia ya que $h_{\mathbf{k}}$ depende de $\Delta_{\mathbf{k}}$. Haciendo uso de (2.13) y (2.14), dicha condición de autoconsistencia

puede reescribirse como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}}. \quad (2.16)$$

Una vez determinada $|\Psi_G\rangle$ se puede calcular la energía del estado base E_G base a partir de la Ec. (2.9) obteniendo

$$E_G = \langle \Psi_G | H | \Psi_G \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi(\mathbf{k}) - \frac{\xi^2(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E(\mathbf{k})} + \mu N. \quad (2.17)$$

El valor medio del número de partículas viene dado por

$$N = \langle \Psi_G | \hat{N} | \Psi_G \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 = \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right), \quad (2.18)$$

o bien,

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E(\mathbf{k})}, \quad (2.19)$$

donde n es el número promedio de partículas por sitio, es decir, $n = N/N_s$. Finalmente, los estados excitados del sistema están descritos por dos tipos de función de onda

$$|\Psi_{ex1}\rangle = c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} (u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}',\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}',\downarrow}^+) |0\rangle, \quad (2.20)$$

$$|\Psi_{ex2}\rangle = (v_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+) \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} (u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}',\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}',\downarrow}^+) |0\rangle, \quad (2.21)$$

donde $|\Psi_{ex1}\rangle$ y $|\Psi_{ex2}\rangle$ describen la excitación de una sola partícula y la excitación de un par de partículas sobre el estado base, respectivamente. Las energías de excitación pueden calcularse a partir de $E_{ex1} = \langle \Psi_{ex1} | H - \mu \hat{N} | \Psi_{ex1} \rangle - \langle \Psi_G | H - \mu \hat{N} | \Psi_G \rangle$ y análogamente para las excitaciones de pares. La evaluación de estos valores de excitación es directa y conduce a

$$E_{ex1}(\mathbf{k}) = \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} = E(\mathbf{k}), \quad (2.22)$$

$$E_{ex2}(\mathbf{k}) = 2E(\mathbf{k}). \quad (2.23)$$

Así, el espectro de excitaciones basado en el estado (2.7), exhibe cuasipartículas de energía $E_{\mathbf{k}}$ con una brecha de energía $|\Delta_{\mathbf{k}}|$.

Finalmente, en el límite de baja densidad de partículas la ecuación BCS de la brecha superconductor (2.16) se reduce a la ecuación de Schrödinger para un solo par (Eagles, 1969; Micnas, *et al.*, 1990), es decir, la teoría BCS es exacta en este límite. Para

comprobarlo escribamos la brecha superconductor $\Delta_{\mathbf{k}}$ como

$$\begin{aligned}\Delta_{\mathbf{k}} &= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E(\mathbf{k}')} \\ &= -\frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \phi(\mathbf{k}'),\end{aligned}\quad (2.24)$$

donde hemos definido

$$\phi(\mathbf{k}) \equiv \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E(\mathbf{k})}.\quad (2.25)$$

Multiplicando ambos lados de la ecuación (2.24) por $2\xi(\mathbf{k})/E(\mathbf{k})$ obtenemos

$$\begin{aligned}2\xi(\mathbf{k})\phi(\mathbf{k}) &= -\frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \phi(\mathbf{k}') \\ &= -(1 - n_{\mathbf{k}}) \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \phi(\mathbf{k}')\end{aligned}\quad (2.26)$$

donde

$$n_{\mathbf{k}} = 1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})},\quad (2.27)$$

satisface [ver Ec. (2.18)]

$$\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = n.\quad (2.28)$$

En el límite de bajas densidades $n_{\mathbf{k}} \ll 1$ y la ecuación (2.26) se reduce a

$$[2\mu - 2\varepsilon(\mathbf{k})] \phi_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \phi(\mathbf{k}').\quad (2.29)$$

puesto que $\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$. Nótese que la ecuación (2.29) es la ecuación de Schrödinger para un solo par en el espacio recíproco, donde 2μ juega el papel del eigenvalor (comparar con la Ec. (3.29)).

2.2 Formalismo de BCS a $T \neq 0$

La ventaja de trabajar en el ensamble gran canónico es más evidente cuando uno desea hacer termodinámica. La función de partición gran canónica es

$$Z_{gc} = \text{Tr} e^{-[H_{BCS} - \mu\hat{N}]/k_B T},\quad (2.30)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann, T es la temperatura y la traza se realiza sobre

todos los conjuntos de números de ocupación. Debido a que H_{BCS} tiene productos de cuatro operadores fermiónicos, la traza no puede llevarse a cabo en forma cerrada. Sin embargo, se puede obtener una excelente aproximación a la termodinámica empleando una técnica de campo medio diseñada para reproducir los resultados a temperatura cero. Para ello escribiremos

$$c_{k,\uparrow}c_{-k,\downarrow} = b_k + (c_{k,\uparrow}c_{-k,\downarrow} - b_k),$$

donde $b_k \equiv \langle c_{k,\uparrow}c_{-k,\downarrow} \rangle$ y solamente se considerarán las cantidades a primer orden del término en paréntesis de la ecuación anterior. El resultado de llevar a cabo este procedimiento es

$$Z_{gc} = \text{Tr} e^{-[H_{CM} - \mu\hat{N}]/k_B T}, \quad (2.31)$$

donde

$$\begin{aligned} H_{CM} - \mu\hat{N} &= \sum_{k,\sigma} \xi(k) n_{k,\sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{kk'} V_{kk'} (b_{k'} c_{k,\uparrow}^+ c_{-k,\downarrow}^+ + b_{k'}^* c_{k,\uparrow} c_{-k,\downarrow} - b_{k'}^* b_k) \\ &= \sum_{k,\sigma} \xi(k) n_{k,\sigma} - \sum_k (\Delta_k c_{k,\uparrow}^+ c_{-k,\downarrow}^+ + \Delta_k^* c_{k,\uparrow} c_{-k,\downarrow} - \Delta_k b_k^*), \end{aligned} \quad (2.32)$$

y

$$\Delta_k = -\frac{1}{N_s} \sum_{k'} V_{kk'} b_{k'}, \quad (2.33)$$

Debido a que ya no aparecen productos de más de dos operadores fermiónicos, la traza en la ecuación (2.31) puede llevarse a cabo de manera exacta. Sin embargo, primero es necesario diagonalizar la Ec. (2.32). Este hamiltoniano puede diagonalizarse mediante la transformación canónica de Bogoliubov

$$\begin{aligned} c_{k,\uparrow} &= u_k^* \gamma_{k0} + v_k \gamma_{k1}^+, \\ c_{-k,\downarrow}^+ &= -v_k^* \gamma_{k0} + u_k \gamma_{k1}^+ \end{aligned}$$

que define nuevos operadores fermiónicos γ_{k0} y γ_{k1} , donde los coeficientes u_k y v_k deben satisfacer

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1. \quad (2.34)$$

Sustituyendo estos nuevos operadores en el hamiltoniano (2.32) y llevando a cabo los productos indicados considerando las propiedades de conmutación de los nuevos operadores fermiónicos, obtenemos

$$\begin{aligned} H_{CM} - \mu\hat{N} &= \sum_k \xi(k) [(|u_k|^2 - |v_k|^2) (\gamma_{k0}^+ \gamma_{k0} + \gamma_{k1}^+ \gamma_{k1}) + 2|v_k|^2 \\ &\quad + 2u_k^* v_k^* \gamma_{k1} \gamma_{k0} + 2u_k v_k \gamma_{k0}^+ \gamma_{k1}^+] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\mathbf{k}} [(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}) (\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \gamma_{\mathbf{k}1} - 1) \\
& + (\Delta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{*2} - \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^{*2}) \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0} + (\Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2) \gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}^+ + \Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^+] \quad (2.35)
\end{aligned}$$

Para diagonalizar el hamiltoniano, escogemos $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ de tal forma que los coeficientes de $\gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}$ y $\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}^+$ en la ecuación anterior sean cero, esto es

$$2\xi(\mathbf{k})u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}^2 = 0. \quad (2.36)$$

Las ecuaciones (2.36) y (2.34) son suficientes para determinar $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ en términos de $\Delta_{\mathbf{k}}$. De la parte imaginaria de la Ec. (2.36) encontramos que $\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}$ es real (Tinkham, 1996) y multiplicando la Ec. (2.36) por $\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}}$ y resolviendo la ecuación de segundo grado resultante obtenemos

$$\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = \sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} - \xi(\mathbf{k}) \equiv E(\mathbf{k}) - \xi(\mathbf{k}). \quad (2.37)$$

Se escogió el signo positivo de la raíz pues es el que corresponde a la solución de mínima energía. De la condición de normalización $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ y sabiendo que $|v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}| = (E(\mathbf{k}) - \xi(\mathbf{k})) / |\Delta_{\mathbf{k}}|$, se encuentra que los coeficientes son

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 - |u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right). \quad (2.38)$$

Aunque las fases de $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ y $\Delta_{\mathbf{k}}$ son individualmente arbitrarias, ellas están relacionadas ya que $\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}$ es real. Esto es, la fase de $v_{\mathbf{k}}$ relativa a $u_{\mathbf{k}}$ debe ser la fase de $\Delta_{\mathbf{k}}$. No se pierde generalidad si escogemos $u_{\mathbf{k}}$ real y positiva. Si lo hacemos así, $v_{\mathbf{k}}$ y $\Delta_{\mathbf{k}}$ deben tener entonces la misma fase. Reescribiendo el hamiltoniano en términos de los nuevos operadores se obtiene

$$H_{CM} - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}) - \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}'} \right) + \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) (\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}) \quad (2.39)$$

El primer término de esta expresión es una constante mientras que el segundo término describe fermiones independientes con energías de excitación $E(\mathbf{k})$, ya que los operadores $\gamma_{\mathbf{k}0}$ y $\gamma_{\mathbf{k}1}$ obedecen las relaciones de conmutación de Fermi-Dirac. El hamiltoniano (2.39) determina las propiedades del sistema en términos de los $b_{\mathbf{k}}$ pero aún se deben determinar dichos números. Aquí es donde el requerimiento de autoconsistencia aparece ya que los números $b_{\mathbf{k}}$ son los promedios cuántico y termodinámico de los operadores $c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow}$ cuando el sistema está descrito por $H_{CM} - \mu\hat{N}$. En mecánica

estadística cuántica se demuestra que tales promedios están dados por (Pathria, 1972)

$$b_{\mathbf{k}} \equiv \langle c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle = \frac{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu \hat{N} \right) \right] c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} \right\}}{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu \hat{N} \right) \right] \right\}}, \quad (2.40)$$

donde $\text{Tr}\{\dots\}$ denota a la traza del operador entre paréntesis en el espacio de Hilbert de los eigenestados de $H_{CM} - \mu \hat{N}$. Reescribiendo los operadores $c_{\mathbf{k}}$ en términos de los operadores $\gamma_{\mathbf{k}}$, la traza puede evaluarse y se obtiene

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}} &= \frac{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu \hat{N} \right) \right] \left(-u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \right) \right\}}{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu \hat{N} \right) \right] \right\}} \\ &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \{1 - 2f[E(\mathbf{k})]\}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

donde

$$f[E(\mathbf{k})] = \frac{1}{e^{E(\mathbf{k})/k_B T} + 1}, \quad (2.42)$$

es la función de Fermi-Dirac. Cabe señalar que hemos utilizado el hecho de que en un sistema de fermiones independientes esta función da la probabilidad de ocupación de un estado particular. Nótese que el denominador contiene $\exp(E(\mathbf{k})/k_B T)$ en vez de $\exp([E(\mathbf{k}) - \mu]/k_B T)$. La razón formal es que aunque μ se encuentra contenido en la definición de $E(\mathbf{k})$, no multiplica a los operadores fermiónicos en la ecuación (2.39). Físicamente, la razón es que $\gamma_{\mathbf{k}0}^+$ (o $\gamma_{\mathbf{k}1}^+$) crea un estado excitado pero no cambia el número de partículas. Finalmente, sustituyendo las ecuaciones (2.41), y (2.38) en (2.33) obtenemos

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E(\mathbf{k}')} \{1 - 2f[E(\mathbf{k}')]\} \\ &= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E(\mathbf{k}')} \tanh \left[\frac{E(\mathbf{k}')}{2k_B T} \right], \end{aligned} \quad (2.43)$$

generalizando así la ecuación de la brecha superconductor a temperaturas finitas. De manera análoga, la ecuación (2.19) se generaliza a

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E(\mathbf{k})} \tanh \left[\frac{E(\mathbf{k}')}{2k_B T} \right]. \quad (2.44)$$

Dados $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, n y T , las ecuaciones no lineales integrales (2.43) y (2.44) deben resolverse para determinar $\Delta_{\mathbf{k}}(n, T)$ y $\mu(n, T)$. En particular, la T_c se obtiene a partir de la condición $\Delta_{\mathbf{k}}(n, T_c) = 0$.

2.3 Hamiltoniano de Hubbard atractivo

El modelo de Hubbard con U negativa describe interacciones locales atractivas entre fermiones. Este hamiltoniano debe considerarse como un modelo efectivo con parámetros renormalizados que contienen una interacción indirecta atractiva, es decir, cuando los electrones polarizan un grado de libertad colectivo de la red, ellos pueden obtener una energía de amarre compartiendo dicha polarización (Auerbach, 1994).

En esta sección aplicaremos, a manera de ejemplo, la teoría de campo medio de BCS al hamiltoniano de Hubbard con U negativa

$$H - \mu\hat{N} = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma}, \quad (2.45)$$

al que hemos agregado el potencial químico μ para fijar el número de partículas y donde \hat{N} es el operador de número. Usando las relaciones (3.23) podemos escribir este hamiltoniano en el espacio de momentos de la siguiente forma

$$H - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k}, \sigma}^+ c_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} U c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^+ c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \uparrow}, \quad (2.46)$$

donde $2\mathbf{q}$ es el momento del centro de masa del par y $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ es la relación de dispersión de una partícula. Dentro del formalismo BCS, los términos con $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ son los únicos términos relevantes para la superconductividad mientras que los términos con $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ pueden reescribirse en la aproximación de campo medio (Dagotto, *et al.*, 1994b; Arrachea, *et al.*, 1997) como $-Un^2 N_s/4 + Un\hat{N}/2$. De esta manera tenemos

$$H - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k}, \sigma}^+ c_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U c_{\mathbf{k}, \uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^+ c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow} - \frac{Un^2}{4} N_s, \quad (2.47)$$

donde $\varepsilon(\mathbf{k})$ es la relación de dispersión de una partícula incluyendo una auto-energía de $Un/2$. Comparando (2.47) con (2.32) y utilizando (2.16) y (2.19), podemos escribir directamente las ecuaciones que describen el estado superconductor a temperatura cero

$$1 = \frac{|U|}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{[(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}}, \quad (2.48)$$

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{[(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}}, \quad (2.49)$$

donde $\Delta \equiv -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} U \langle c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \downarrow} \rangle$. Las ecuaciones integrales (2.48) y (2.49) están acopladas y, en el caso general, el potencial químico μ de los fermiones debe determinarse de manera autoconsistente junto con la brecha superconductor Δ . En el límite

$|U| \gg |t|$, se sigue de las ecuaciones (2.48) y (2.49) que

$$\mu = -\frac{1}{2}|U|, \quad \Delta = \frac{1}{2}|U| \sqrt{n(2-n)}, \quad (2.50)$$

y la mínima energía ($2\Delta_0$) necesaria para romper el par puede obtenerse minimizando $2E(\mathbf{k}) = 2 [(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}$, es decir

$$2\Delta_0 \equiv 2\sqrt{\left(\mu - \frac{Un}{2}\right)^2 + \Delta^2} = |U|, \quad (2.51)$$

que corresponde a la energía de amarre de un par. Asimismo, en el límite de baja densidad ($n \ll 1$) tenemos que

$$\mu = -\frac{1}{2}|U|, \quad \Delta = |U| \sqrt{n/2}. \quad (2.52)$$

Como en este límite la ecuación BCS se reduce a la ecuación de Schrödinger para un solo par, la ecuación (2.52) implica que a primer orden μ está dado por la mitad de la energía de amarre de un solo par.

Capítulo 3

Apareamiento de Huecos

Los cupratos superconductores tienen en común varias características tales como alta temperatura de transición a densidades bajas de portadores y una longitud de coherencia pequeña, del orden de la distancia entre partículas (Batlogg, 1998). Estas características son consistentes con la hipótesis de que el apareamiento de huecos tiene su origen en interacciones no retardadas de corto alcance y apoyan la descripción de estos materiales por medio de modelos con interacciones locales. Un modelo genérico, que puede pensarse como una primera aproximación del problema, es el modelo de Hubbard así como sus diversas extensiones. Desafortunadamente, como ya hemos mencionado, este modelo solo ha podido resolverse de manera exacta para sistemas de una e infinitas dimensiones. Para el caso de dos dimensiones, que se cree puede ser relevante para la superconductividad de alta T_c , existen muy pocos resultados exactos. Asimismo, el problema de dos fermiones interaccionando por medio del modelo de Hubbard estándar ha recibido considerable atención (Chen y Mei, 1989; Fabrizio, *et al.*, 1991; Navarro y Wang, 1992a; Caffarel y Mosseri, 1998) pues su estudio podría proveer un mecanismo para explicar el apareamiento en los cupratos superconductores así como una guía para encontrar soluciones con un mayor número de partículas.

Por otra parte, dos casos particulares del modelo de Hubbard extendido han sido estudiados ampliamente. Uno es el caso de interacción atractiva intra-sitio ($U < 0$), es decir, cuando la atracción local efectiva inducida de dos partículas situadas en un mismo sitio supera la repulsión coulombiana entre ellas. Este hamiltoniano ha sido considerado como un modelo efectivo de superconductividad en la familia de los bismutatos de bario ($Ba_{1-x}K_xBiO_3$, $Ba_{1-x}Pb_xBi_{1-x}O_3$), los fullerenos, y las fases de Chevrel (Micnas, *et al.*, 1990). El segundo caso es el modelo de Hubbard extendido con interacción atractiva inter-sitio ($V < 0$), el cual permite describir apareamientos con diferentes simetrías teniendo mayor relevancia en el estudio de la familia de cupratos superconductores así como para los superconductores de fermiones pesados (Micnas, *et al.*, 1999).

Un tipo diferente de interacción no clásica que puede dar lugar a la formación de pares sin la necesidad de invocar interacciones densidad-densidad atractivas fue propuesta por J. E. Hirsch con el fin de explicar la formación de pares en los cupratos superconductores por el mecanismo denominado *undressing* (Hirsch, 1989; 2000). El término clave adicional es una interacción de carga-enlace (Δt), la cual puede interpretarse intuitivamente como un término de salto que depende de la densidad electrónica (salto correlacionado), es decir, incrementa la amplitud de salto entre sitios vecinos cuando uno de los dos orbitales involucrados en el proceso está ocupado por una partícula. Como se vió en el capítulo 1, dicho término emerge naturalmente de la construcción de un hamiltoniano de muchas partículas con interacciones locales aunque

también puede pensarse como una interacción efectiva que involucra grados de libertad electrónicos o bosónicos (Hirsch, 2001). La idea básica de *undressing* parte del hecho de que en un sólido los electrones y los huecos están *vestidos* por sus interacciones con la red, dando lugar a su masa efectiva. Las interacciones entre estas quasipartículas, tales como la de carga-enlace, podrían incrementar la amplitud de salto si la ocupación local alrededor de la quasipartícula crece, esto conduce a una disminución de la masa efectiva, es decir, a un ensanchamiento de la banda. En consecuencia, se espera una reducción de la energía cinética si el sistema tiene una densidad baja de quasipartículas, y un aumento de la probabilidad de encontrar dos quasipartículas espacialmente juntas como se puede apreciar más adelante en el esquema del espacio de estados.

En este capítulo se hará un análisis detallado del proceso de apareamiento y la dinámica de los pares de huecos formados a partir de Δt . Para ello se introducirá una extensión del método del espacio de estados y su mapeo (Pérez y Wang, 1998a) con el fin de incluir el término Δt , y así analizar la formación de pares de partículas mediante el hamiltoniano de Hubbard generalizado en redes de una, dos y tres dimensiones, finalizando con los diagramas de fase del estado base de un par en dichas redes.

3.1 Método del espacio de estados

En esta sección se presenta de manera detallada una extensión del método del espacio de estados (Navarro y Wang, 1992a, 1992b), que permite diagonalizar en forma exacta el hamiltoniano de Hubbard generalizado para redes infinitas con pocos electrones, trabajando en el espacio real. Este método consiste en mapear el problema de Hubbard a un problema de amarre fuerte con impurezas en un espacio de mayor dimensión.

Con el fin de explicar de una manera sencilla este método, primero analizaremos un sistema unidimensional constituido por dos electrones con espines opuestos interactuando a través del modelo de Hubbard generalizado (1.24) en una cadena lineal de N sitios ($N = 2, 3, 4, \dots$). Para $N = 2$, por ejemplo, los posibles estados de configuración de este sistema serán

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= |\pm 0\rangle, \\
 |2\rangle &= |+-\rangle, \\
 |3\rangle &= |0\pm\rangle, \\
 |4\rangle &= |-+\rangle,
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

donde el signo $+$ representa un electrón con espín hacia arriba (es decir, la componente z del espín del electrón es $\hbar/2$), el signo $-$ un electrón con espín hacia abajo (la componente z del espín del electrón es $-\hbar/2$) y el signo \pm un sitio con dos electrones, uno con espín hacia arriba y otro con espín hacia abajo, finalmente el 0 representa un sitio vacío. Esta red de estados se muestra esquemáticamente en la figura 3.1.

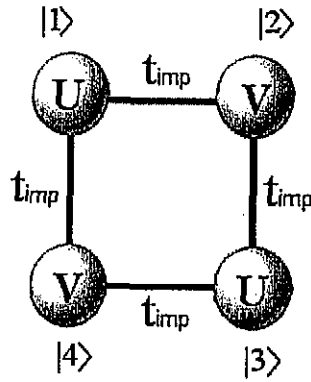


Figura 3.1. Representación geométrica de los estados de dos partículas con espines opuestos en una cadena de dos sitios. Los estados de configuración están representados por círculos con las auto-energías y los parámetros de salto indicados dentro y entre ellos, respectivamente. La numeración de los estados corresponde a la Ec. (3.1).

En la base de estados de configuración Ec. (3.1), los elementos de matriz del hamiltoniano (1.24) distintos de cero son

$$\begin{aligned}
 \langle 2|H|1\rangle &= \langle 1|H|2\rangle = t_{imp}, \\
 \langle 4|H|1\rangle &= \langle 1|H|4\rangle = t_{imp}, \\
 \langle 3|H|2\rangle &= \langle 2|H|3\rangle = t_{imp}, \\
 \langle 4|H|3\rangle &= \langle 3|H|4\rangle = t_{imp}, \\
 \langle 1|H|1\rangle &= \langle 3|H|3\rangle = U, \\
 \langle 2|H|2\rangle &= \langle 4|H|4\rangle = V.
 \end{aligned}
 \tag{3.2}$$

En este espacio de estados, la auto-energía de los estados $|1\rangle$ y $|3\rangle$ es U mientras que la auto-energía de los estados $|2\rangle$ y $|4\rangle$ es V . Nótese que el salto entre estados donde al menos uno de ellos tiene auto-energía distinta de cero, está dado por $t_{imp} = t + \Delta t$, puesto que la interacción de carga-enlace Δt tiene contribución en los procesos de salto hacia o desde estados doblemente ocupados. De esta manera, el problema de dos partículas interactuando entre sí ha sido mapeado al de una sola partícula en un problema de amarre fuerte. Si el operador b_i^+ crea el estado $|i\rangle$ en la Ec. (3.1), el nuevo hamiltoniano puede escribirse como (Trugman, 1990)

$$\tilde{H} = \sum_i \epsilon_i b_i^+ b_i + \sum_{i,j} t_{ij} b_i^+ b_j,
 \tag{3.3}$$

donde $t_{13} = t_{31} = t_{24} = t_{42} = 0$ y $t_{ij} = t_{imp}$, en los demás casos. Asimismo $\epsilon_1 = \epsilon_3 = U$ y $\epsilon_2 = \epsilon_4 = V$. Sin embargo, los sitios en este problema de amarre fuerte representan estados de muchos cuerpos y no las funciones de Wannier que usualmente

se utilizan. En notación matricial \tilde{H} viene dada por

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} U & t_{imp} & 0 & t_{imp} \\ t_{imp} & V & t_{imp} & 0 \\ 0 & t_{imp} & U & t_{imp} \\ t_{imp} & 0 & t_{imp} & V \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Esta matriz puede diagonalizarse de manera exacta. Los cuatro valores propios son

$$\begin{aligned} E_1 &= U, \\ E_2 &= V, \\ E_3 &= \frac{1}{2}V + \frac{1}{2}U + \frac{1}{2}\sqrt{(V^2 - 2UV + U^2 + 16t_{imp}^2)}, \\ E_4 &= \frac{1}{2}V + \frac{1}{2}U - \frac{1}{2}\sqrt{(V^2 - 2UV + U^2 + 16t_{imp}^2)}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

mientras que los vectores propios (sin normalizar) que corresponden a estas energías son

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= |1\rangle - |3\rangle, \\ |\psi_2\rangle &= |2\rangle - |4\rangle, \\ |\psi_3\rangle &= \left(\frac{U - V}{4t_{imp}} + \sqrt{\left(\frac{U - V}{4t_{imp}}\right)^2 + 1} \right) (|1\rangle + |3\rangle) + |2\rangle + |4\rangle, \\ |\psi_4\rangle &= \left(\frac{U - V}{4t_{imp}} - \sqrt{\left(\frac{U - V}{4t_{imp}}\right)^2 + 1} \right) (|1\rangle + |3\rangle) + |2\rangle + |4\rangle. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Así, en este sencillo ejemplo, hemos podido encontrar una solución exacta al problema de Hubbard mapeándolo a un problema de amarre fuerte. En general, el número de estados de configuración para una red cualquiera de N sitios con dos electrones con espines opuestos es N^2 . Para el caso de dos electrones en una cadena lineal con un número infinito de sitios, la red de estados tiene la forma de un arreglo cuadrático bidimensional infinito con un número infinito de impurezas, localizadas en las cadenas diagonales (ver figura 3.2).

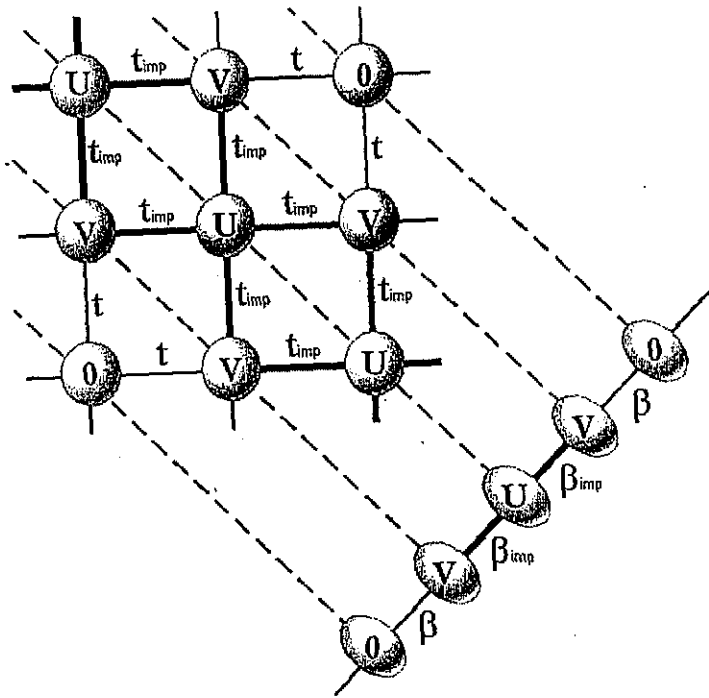


Figura 3.2. Esquema de la red de estados correspondiente al problema de dos electrones con espines opuestos en una cadena lineal. Los estados de configuración están representados por círculos con las auto-energías y las integrales de salto indicadas dentro y entre ellos, respectivamente. Los estados efectivos finales están representados por elipses y las integrales de salto efectivas son $\beta_{imp} = 2t_{imp}\cos(Ka/2)$ y $\beta = 2t\cos(Ka/2)$, donde $t_{imp} = t + \Delta t$, K es el vector de onda del par y a es la constante de red.

Para demostrar esto, denotemos por $\{m, n\}$ el estado de configuración que tiene un electrón con espín hacia arriba en el sitio m y un electrón con espín hacia abajo en el sitio n . Asimismo, es conveniente escribir el hamiltoniano de Hubbard generalizado [Ec. (1.24)] como

$$H = H_t + H_U + H_V + H_{\Delta t}, \quad (3.7)$$

donde

$$H_t = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} \quad (3.8)$$

$$H_U = U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (3.9)$$

$$H_V = \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j \quad (3.10)$$

$$H_{\Delta t} = \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} (n_{i,-\sigma} + n_{j,-\sigma}). \quad (3.11)$$

De esta manera tenemos

$$\begin{aligned}
H_t |m, n\rangle &\equiv t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} c_{i, \sigma}^+ c_{j, \sigma} |m, n\rangle = t \sum_{\langle i, j \rangle} (c_{i, \uparrow}^+ c_{j, \uparrow} + c_{i, \downarrow}^+ c_{j, \downarrow}) |m, n\rangle \\
&= t \sum_{\langle i, j \rangle} (\delta_{j, m} |i, n\rangle + \delta_{j, n} |m, i\rangle) \\
&= t \sum_i (\delta_{i-1, m} |i, n\rangle + \delta_{i+1, m} |i, n\rangle + \delta_{i-1, n} |m, i\rangle + \delta_{i+1, n} |m, i\rangle) \\
&= t (|m+1, n\rangle + |m-1, n\rangle + |m, n+1\rangle + |m, n-1\rangle) \quad (3.12)
\end{aligned}$$

Asimismo,

$$H_U |m, n\rangle \equiv U \sum_i n_{i, \uparrow} n_{i, \downarrow} |m, n\rangle = U \sum_i \delta_{m, i} \delta_{n, i} |m, n\rangle = U \delta_{m, n} |m, n\rangle, \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned}
H_V |m, n\rangle &\equiv \frac{V}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} n_i n_j |m, n\rangle = \frac{V}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} (n_{i, \uparrow} + n_{i, \downarrow}) (n_{j, \uparrow} + n_{j, \downarrow}) |m, n\rangle \\
&= \frac{V}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} (n_{i, \uparrow} n_{j, \uparrow} + n_{i, \downarrow} n_{j, \downarrow} + n_{i, \uparrow} n_{j, \downarrow} + n_{i, \downarrow} n_{j, \uparrow}) |m, n\rangle \\
&= \frac{V}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} (\delta_{i, m} \delta_{j, m} + \delta_{i, n} \delta_{j, n} + \delta_{i, m} \delta_{j, n} + \delta_{i, n} \delta_{j, m}) |m, n\rangle \\
&= \frac{V}{2} \sum_i (\delta_{i, m} \delta_{i+1, n} + \delta_{i, m} \delta_{i-1, n} + \delta_{i, n} \delta_{i+1, m} + \delta_{i, n} \delta_{i-1, m}) |m, n\rangle \\
&= \frac{V}{2} (\delta_{m+1, n} + \delta_{m-1, n} + \delta_{m, n+1} + \delta_{m, n-1}) |m, n\rangle \\
&= V (\delta_{m, n-1} + \delta_{m, n+1}) |m, n\rangle, \quad (3.14)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{\Delta t} |m, n\rangle &\equiv \Delta t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} c_{i, \sigma}^+ c_{j, \sigma} (n_{i, -\sigma} + n_{j, -\sigma}) |m, n\rangle = \\
&= \Delta t \sum_{\langle i, j \rangle} [c_{i, \uparrow}^+ c_{j, \uparrow} n_{i, \downarrow} + c_{i, \uparrow}^+ c_{j, \uparrow} n_{j, \downarrow} + c_{i, \downarrow}^+ c_{j, \downarrow} n_{i, \uparrow} + c_{i, \downarrow}^+ c_{j, \downarrow} n_{j, \uparrow}] |m, n\rangle \\
&= \Delta t \sum_{\langle i, j \rangle} [\delta_{j, m} \delta_{i, n} |i, n\rangle + \delta_{j, m} \delta_{j, n} |i, n\rangle + \delta_{j, n} \delta_{i, m} |m, i\rangle + \delta_{j, n} \delta_{j, m} |m, i\rangle] \\
&= \Delta t \sum_i [(\delta_{i-1, m} \delta_{i, n} + \delta_{i+1, m} \delta_{i, n}) |i, n\rangle + (\delta_{i-1, m} \delta_{i-1, n} + \delta_{i+1, m} \delta_{i+1, n}) |i, n\rangle]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (\delta_{i-1,n}\delta_{i,m} + \delta_{i+1,n}\delta_{i,m}) |m, i\rangle + (\delta_{i-1,n}\delta_{i-1,m} + \delta_{i+1,n}\delta_{i+1,m}) |m, i\rangle \\
= & \Delta t [(\delta_{m,n} + \delta_{m+1,n}) |m + 1, n\rangle + (\delta_{m,n} + \delta_{m-1,n}) |m - 1, n\rangle] \\
& + \Delta t [(\delta_{m,n} + \delta_{m,n+1}) |m, n + 1\rangle + (\delta_{m,n} + \delta_{m,n-1}) |m, n - 1\rangle]. \quad (3.15)
\end{aligned}$$

En resumen tenemos

$$\begin{aligned}
H |m, n\rangle = & (U\delta_{m,n} + [V(\delta_{m,n-1} + \delta_{m,n+1})]) |m, n\rangle \\
& + (t + \Delta t [\delta_{m,n} + \delta_{m+1,n}]) |m + 1, n\rangle \\
& + (t + \Delta t [\delta_{m,n} + \delta_{m-1,n}]) |m - 1, n\rangle \\
& + (t + \Delta t [\delta_{m,n} + \delta_{m,n+1}]) |m, n + 1\rangle \\
& + (t + \Delta t [\delta_{m,n} + \delta_{m,n-1}]) |m, n - 1\rangle. \quad (3.16)
\end{aligned}$$

Si ahora interpretamos el estado de dos partículas $|m, n\rangle$ en una cadena lineal como el correspondiente a *una* sola partícula en el sitio m, n de una red *cuadrada*, es claro que H se puede interpretar entonces como un hamiltoniano de amarre fuerte que representa una red cuadrada con impurezas U en una diagonal ($m = n$), impurezas V en las dos diagonales adyacentes ($m = n \pm 1$), integrales de salto $t_{imp} = t + \Delta t$ entre dos sitios con impurezas e integrales de salto t entre el resto de los sitios. La representación geométrica de esta red puede verse en la figura 3.2. Por lo tanto, el problema original del hamiltoniano de Hubbard generalizado en una cadena lineal con dos electrones con espines opuestos es equivalente a un problema de amarre fuerte de una red bidimensional que contiene impurezas tanto en las autoenergías (U ó V) como en los enlaces (t_{imp}). En el caso del hamiltoniano de Hubbard extendido los estados apareados corresponden a los estados de impureza de la red de estados debido a las auto-energías U o V negativas. En el caso del hamiltoniano de Hubbard generalizado, los estados correlacionados se originan de los enlaces aumentados (impurezas de enlace), con o sin U o V negativas.

Este problema de amarre fuerte equivalente puede resolverse aprovechando la simetría traslacional que la red de estados tiene en la dirección de las diagonales con impurezas. Usando el método introducido por Falicov e Yndurain (1975), se puede mapear la red bidimensional de estados a una cadena lineal, como se muestra en la figura 3.2, donde $\beta_{imp} = 2t_{imp}\cos(Ka/2)$ y $\beta = 2t\cos(Ka/2)$ son los parámetros de salto efectivos siendo a la constante de red y K el vector de onda del centro de masa del par. En otras palabras, estamos tratando la red bidimensional en un espacio combinado, donde la dirección con simetría traslacional se analiza en el espacio recíproco mientras que la dirección que no conserva dicha simetría se estudia en el espacio real (Wang, 1989). De esta forma, para cada K se tiene una red unidimensional efectiva que puede resolverse usando el método de la matriz de transferencia, o bien, por diagonalización directa. En el caso de dos partículas con espines antiparalelos en una red cuadrada infinita, tenemos que $n = 2$ y $d = 2$, y los estados de configuración forman una red

hipercúbica en un espacio de cuatro dimensiones. La manera de encontrar la solución es similar al caso unidimensional. Primero, se realiza un mapeo del arreglo de estados de cuatro dimensiones a una red efectiva de dos dimensiones (figura 3.3), solamente que ahora se tienen cuatro parámetros de transferencia efectivos: $\beta_x^{imp} = 2t_{imp}\cos(K_x a/2)$, $\beta_y^{imp} = 2t_{imp}\cos(K_y a/2)$, $\beta_x = 2t\cos(K_x a/2)$ y $\beta_y = 2t\cos(K_y a/2)$, donde K_x y K_y son las componentes del vector de onda del centro de masa del par. Para cada vector de onda (K_x, K_y) se tiene una red cuadrada de estados efectivos con una impureza central con autoenergía U , rodeada por cuatro estados cuya autoenergía es V y los demás estados con autoenergía igual a cero.

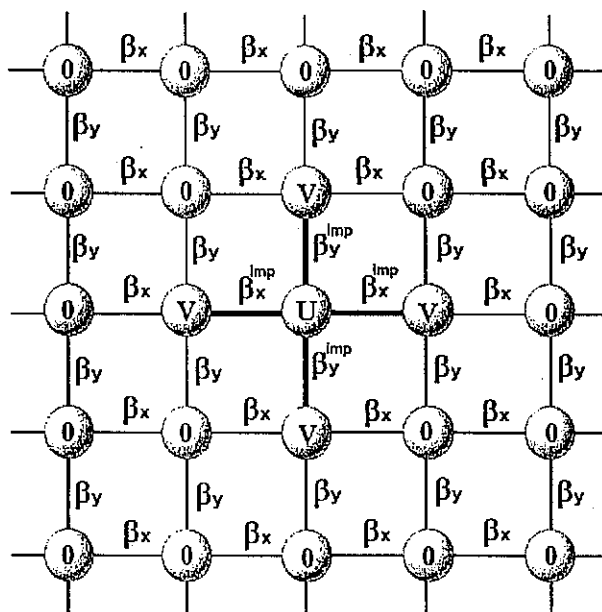


Figura 3.3. Esquema de la red de estados proyectada correspondiente al problema de dos partículas con espines opuestos en una red cuadrada.

En la figura 3.4 se muestra la red de estados proyectada correspondiente al problema de dos partículas con espines opuestos en una red triangular. Nótese que ahora hay seis parámetros de salto diferentes en la red triangular proyectada dados por $\beta_x^{imp} = 2t_{imp}\cos(K_x a/2)$, $\beta_{y\pm}^{imp} = 2t_{imp}\cos\left[\frac{a}{2\sqrt{2}}(K_x \pm \sqrt{3}K_y)\right]$, $\beta_x = 2t\cos(K_x a/2)$, $\beta_{y\pm} = 2t\cos\left[\frac{a}{2\sqrt{2}}(K_x \pm \sqrt{3}K_y)\right]$. Para el caso general de n electrones en un cristal de d dimensiones, el arreglo geométrico del conjunto de estados corresponde a una red de nd -dimensiones, donde el principio de exclusión de Pauli determina la forma geométrica de dicha red. Este arreglo de estados puede ser descrito por medio de un hamiltoniano de amarre fuerte donde, en el caso de dos partículas, la autoenergía de los estados con un sitio doblemente ocupado estará dada por U , la autoenergía para los estados con sitios vecinos que estén simplemente ocupados estará dada por V y los demás estados

tendrán autoenergía igual a cero. La integral de salto entre dos estados vecinos será t_{imp} si al menos uno de ellos tiene auto-energía distinta de cero y t en los demás casos.

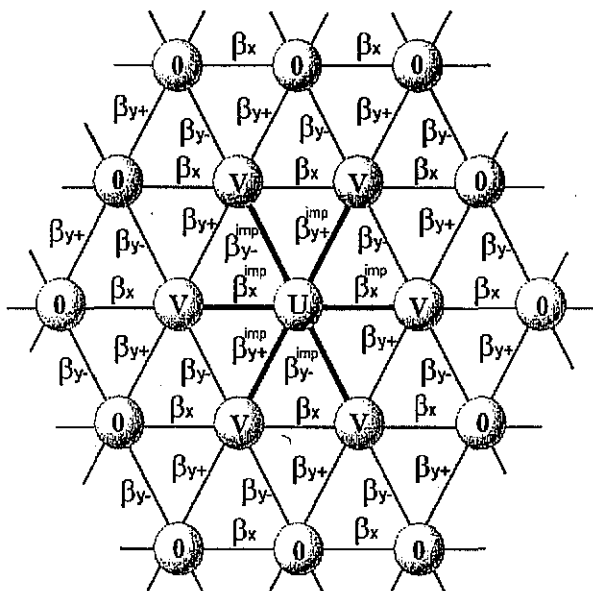


Figura 3.4. Esquema de la red de estados proyectada correspondiente al problema de dos partículas con espines opuestos en una red triangular.

Ahora bien, los electrones son partículas indistinguibles de espín un medio y por lo tanto, satisfacen el principio de exclusión de Pauli, es decir, la función de onda ψ de un sistema de fermiones es antisimétrica bajo el intercambio de cualesquiera dos partículas. Cuando el hamiltoniano no depende del espín, dicha función de onda siempre puede escribirse como un producto de una función de onda espacial u orbital ϕ que sólo depende de las coordenadas (\mathbf{r}_i) de las partículas y una función χ que solo depende de las proyecciones de espín (s_i^z) de las mismas

$$\psi(\zeta_1, \zeta_2, \dots) = \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)\chi(s_1^z, s_2^z, \dots). \quad (3.17)$$

En esta relación ζ_i representa el conjunto de tres coordenadas espaciales y la proyección de espín de la partícula i . En este caso, la ecuación de Schrödinger sólo determina la función de onda espacial ϕ , dejando la función χ arbitraria. Si el sistema consta de dos partículas, aquellos estados con funciones espaciales simétricas [$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$] corresponden a un estado de espín antisimétrico (singulete), ya que $\chi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)]$, donde $\alpha(i)$ y $\beta(j)$ son respectivamente estados de espín con $s_i^z = \hbar/2$ y $s_j^z = -\hbar/2$. Por otro lado, los estados con funciones espaciales antisimétricas [$\phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$] corresponden a los estados de espín simétricos (triplete) dados por $\chi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)]$, $\chi_s = \alpha(1)\alpha(2)$,

o $\chi_s = \beta(1)\beta(2)$. De esta manera, al resolver el problema de amarre fuerte en el espacio de estados, se obtendrá un conjunto de soluciones. De este conjunto, las funciones de onda simétricas corresponden al singlete mientras que las funciones de onda antisimétricas corresponden al triplete.

3.2 Propiedades físicas de los pares

Con el fin de estudiar el apareamiento de dos partículas así como la dinámica de estos estados, se analizaron la energía de amarre, la longitud de coherencia y la masa efectiva de los pares. La energía de amarre de dos partículas (Δ_2) puede definirse como

$$\Delta_2 \equiv 2E_1 - E_2, \quad (3.18)$$

donde E_n es la energía del estado base de n partículas. En la figura 3.5 las energías de amarre entre dos electrones y entre dos huecos se analizan comparativamente para una cadena lineal, una red cuadrada y una red triangular como función de Δt para $U = 0$ y $V = 3|t_0|$. Observe que para $0 \leq \Delta t/|t_0| \leq 2/3$ existe un fuerte apareamiento de huecos en las tres redes analizadas mientras que el apareamiento de electrones requiere $\Delta t/|t_0| \geq 2$, lo cual es mucho mayor que los valores estimados de Δt (Hubbard, 1963; Appel, *et al.*, 1993). Por esta razón de aquí en adelante consideraremos solamente el apareamiento entre huecos.

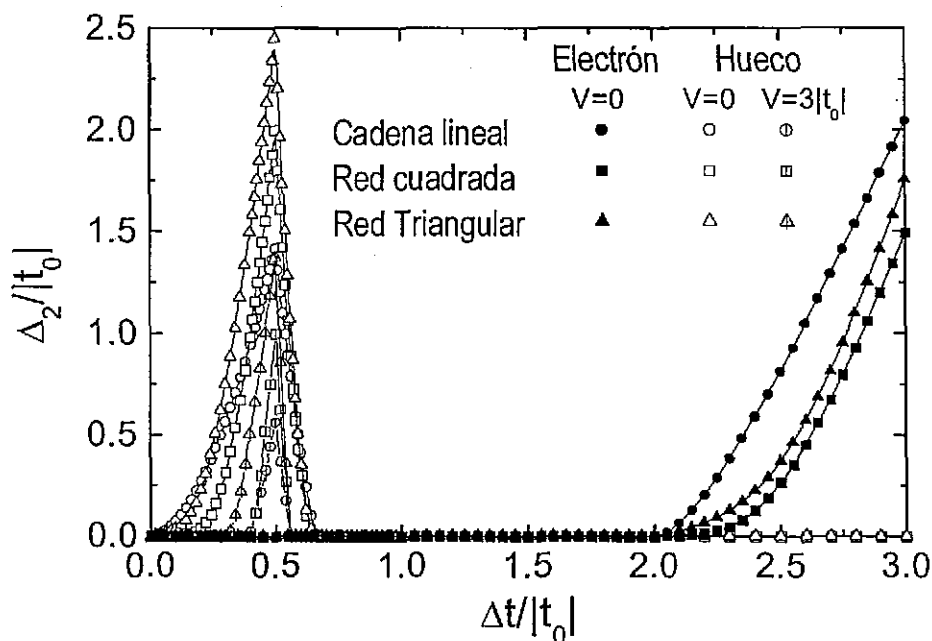


Figura 3.5. Energías de amarre para singletes de electrones y singletes de huecos en las redes lineal, cuadrada y triangular para $U = 0$.

En la figura 3.6(a), las energías de amarre de dos huecos en función de Δt , para

$U = V = 0$, se muestran para una cadena lineal, una red cuadrada, una red triangular y una red cúbica simple. Las diagonalizaciones se realizaron en las redes proyectadas truncadas correspondientes con 301, 3969, 5677 y 35937 estados efectivos, respectivamente. Los tamaños de las matrices para los cálculos numéricos se escogieron como el mínimo tamaño a partir del cual las cantidades físicas no tienen una variación importante con el tamaño de la matriz.

Como ya se comentó, en la región $0 \leq \Delta t / |t_0| \leq 2/3$ hay un fuerte apareamiento entre huecos en los sistemas de una y dos dimensiones, mientras que en la red cúbica simple $0.294 \leq \Delta t / |t_0| \leq 0.613$, requiriéndose un valor mínimo de Δt para que haya formación de pares. En el caso de una y dos dimensiones, el intervalo de apareamiento puede obtenerse a partir del siguiente argumento. En el esquema del espacio de estados, la formación de un par corresponde a la formación de un estado de impureza, en este caso la impureza se da en los enlaces que unen el sitio central de la red de estados proyectada con sus Z primeros vecinos. Si la magnitud del parámetro de salto en estos enlaces es mayor que en el resto de los enlaces, es decir $|t_0 - \Delta t| \geq |t_0 - 2\Delta t|$, entonces se formarán estados de impureza fuera de la banda. Por otra parte, el máximo de la energía de amarre se alcanza en $\Delta t = 0.5 |t_0|$ ya que en este punto la energía cinética de los huecos es mínima. De hecho en este caso es posible encontrar una solución analítica para el espectro de energías de dos partículas, ya que el problema se reduce al de una partícula en una molécula de $Z + 1$ sitios en el espacio proyectado, como puede verse en la figura 3.2 para el caso de la cadena lineal. Así, la energía más baja de un par para cada valor K del vector de onda del centro de masa del par resulta ser

$$E_2(\mathbf{K}) = \frac{1}{2}(U + V) - \frac{1}{2}\sqrt{(U - V)^2 + 4Zt_0^2 \cos^2(|\mathbf{K}|a/\sqrt{2Z})} \quad (3.19)$$

La energía del estado base se obtiene para $K = 0$ y en consecuencia la energía de amarre es

$$\Delta_2 = \frac{1}{2} \left[\sqrt{(U - V)^2 + 4Zt_0^2} - (U + V) \right] \quad (3.20)$$

ya que para $\Delta t = 0.5t_0$, $E_1 = 0$ (ver Ec. (3.18)). De la ecuación (3.20) se sigue que, en el caso particular $\Delta t = 0.5t_0$, la condición para que exista apareamiento ($\Delta_2 > 0$) es

$$UV \leq 4Zt_0^2. \quad (3.21)$$

Otra cantidad física que caracteriza al par es su longitud de coherencia, la cual puede calcularse como $\xi = \langle r^2 \rangle^{1/2}$, donde

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\sum_{\mathbf{R}} \psi^*(\mathbf{r}) r^2 \psi(\mathbf{r})}{\sum_{\mathbf{R}} \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})} \quad (3.22)$$

es el radio cuadrado promedio del par, $\psi(\mathbf{r})$ es la función de onda de dos partículas y r

representa las coordenadas internas del par. Si la función de onda tuviera un comportamiento exponencial con una longitud característica ξ_0 , la diferencia entre ξ y ξ_0 sería despreciable. De hecho, ξ puede reducirse a la longitud de coherencia de la teoría BCS introduciendo un factor numérico de $2\sqrt{2}/\pi$ (Hirsch y Marsiglio, 1989). Asimismo, cabe señalar que la longitud de coherencia de los estados no correlacionados escala con el tamaño del sistema. La figura 3.6(b) muestra las longitudes de coherencia para huecos en las mismas cuatro redes analizadas en la figura 3.6(a). Puede observarse que en general una longitud de coherencia corta siempre está asociada a una energía de amarre grande. Sin embargo, no se encuentra una relación de proporcionalidad inversa entre estas dos cantidades como sucede en la teoría BCS (Bardeen, *et al.*, 1957). Finalmente, el mínimo de la longitud de coherencia ($\xi_{\min} = a/\sqrt{2}$) se alcanza en $\Delta t = 0.5t_0$, el cual también se obtiene de manera analítica ya que en este caso la función de onda tiene amplitud no nula únicamente en los $Z + 1$ sitios centrales de la red de estados efectiva.

Para estudiar la dinámica de los pares, un parámetro fundamental es su masa efectiva (m_2), la cual se calcula a partir de una expansión en serie de Taylor de la relación de dispersión del estado base del par. En la figura 3.6(c) se grafica el cociente de la masa efectiva de los pares y la masa efectiva del estado más bajo no correlacionado (m_1) encontrándose una reducción significativa de $m_2/2m_1$ alrededor de $\Delta t = 0.5t_0$. Esto se debe a que la masa efectiva de los huecos (m_1) tiende a infinito puesto que su parámetro de salto efectivo ($t = t_0 - 2\Delta t$) tiende a cero en la vecindad de $\Delta t = 0.5t_0$. De hecho, en este caso es posible calcular analíticamente la masa efectiva del par a partir de la relación de dispersión del par $E(K)$ dada por la ecuación (3.19):

$$m_2 = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E(K)}{\partial K^2} \Big|_{K=0} \right)^{-1} = \hbar^2 \sqrt{(U - V)^2 + 4Zt_0/(at_0)^2}. \text{ En particular para } U =$$

$V = 0$, la ecuación anterior se reduce a $m_2 = \frac{\hbar^2 \sqrt{Z}}{a^2 t_0} = \frac{2\hbar^2 \sqrt{Z}}{a^2 \Delta t}$. En la figura 3.7 se muestra la variación de la masa efectiva del singulete de huecos (m_2) en función de Δt para las redes lineal, cuadrada y cúbica en comparación con la masa efectiva de un solo hueco (m_1) en las mismas redes (línea punteada). Para que la figura sea clara, hemos normalizado m_2 por $2m_1^0$, donde $m_1^0 \equiv m_1(\Delta t = 0)$. Debe enfatizarse que, aún cuando la masa efectiva de un solo hueco puede llegar ser muy grande, la masa efectiva del par siempre es finita y menor que la de dos huecos no apareados. Esto contrasta con lo que sucede en el hamiltoniano de Hubbard extendido donde se desprecia la interacción Δt y solo se consideran U o V negativos, ya que en este caso al crecer $|U|$ o $|V|$, la masa efectiva del par se incrementa con respecto a la masa efectiva de dos partículas sin correlación como se muestra en la figura 3.8 (Pérez y Wang, 1999). Para un par con energía de amarre muy grande originada por una interacción efectiva $-|U|$ o $-|V|$, la masa efectiva es grande ya que el par solo se puede mover via estados fermiónicos intermedios en los cuales el par se rompe. En particular, en el caso en el que el apareamiento se debe a una interacción $U < 0$, la energía de amarre es $\Delta_2 \approx |U|$ ($|U| \gg |t|$) y la masa efectiva del par es $m_2 \sim \frac{|U|+V}{2t^2}$. De esta última ecuación podría parecer que m_2 puede ser arbitrariamente pequeña para $V \sim -|U|$. Sin embargo, en este caso dicha ecuación no se aplica y puede demostrarse que $m_2 \sim m_1$. Similarmente,

si el apareamiento se debe a una interacción $V < 0$ tenemos, para el caso en el que $U > 0$, que la energía de amarre es $\Delta_2 \approx |V|$ ($|V| \gg |t|$) y la masa efectiva del del par $m_2 \sim \frac{|V|}{t^2}$.

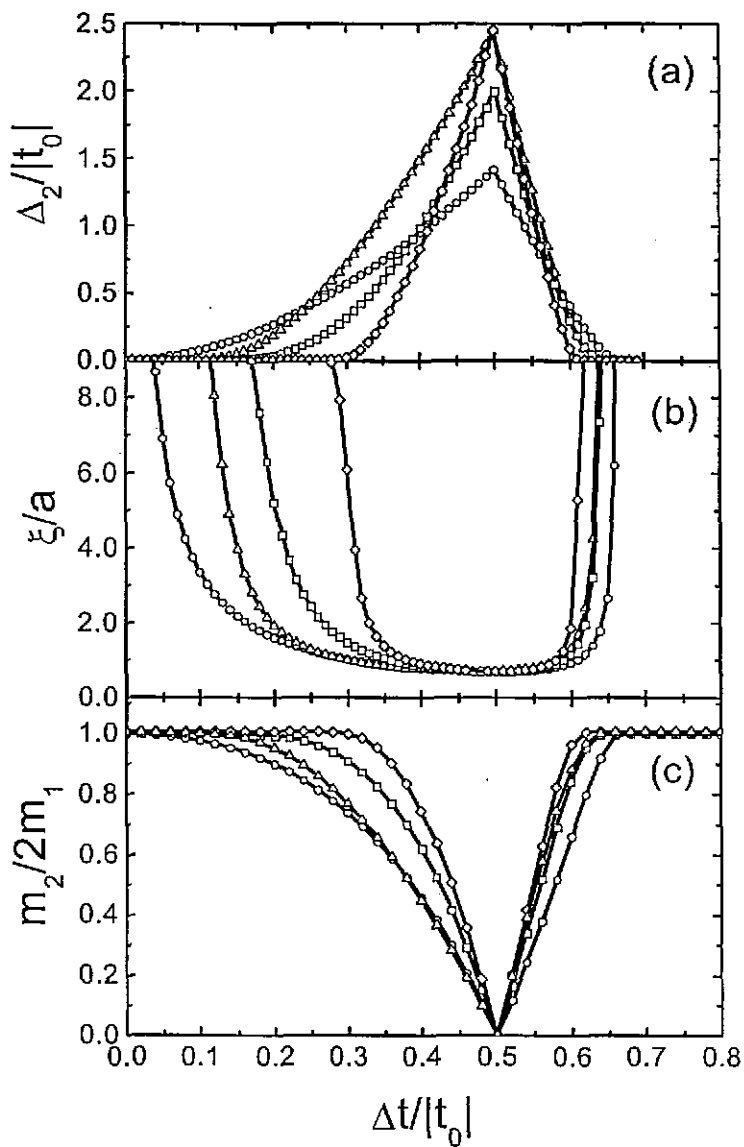


Figura 3.6 (a) Energía de amarre, (b) longitud de coherencia y (c) masa efectiva de un singlete de huecos para una cadena lineal (círculos abiertos), una red cuadrada (cuadrados abiertos), una red triangular (triángulos abiertos) y una red cúbica simple (diamantes abiertos).

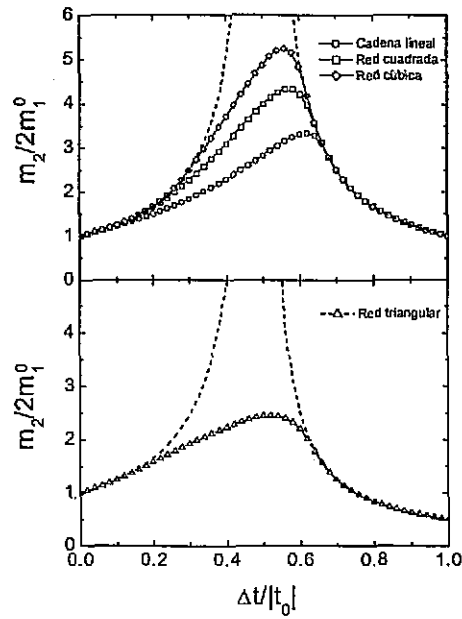


Figura 3.7. Masas efectivas (m_2) de los singletes de huecos en las redes lineal, cuadrada, cúbica y triangular como función de Δt para $U = V = 0$. Las líneas punteadas denotan la masa efectiva de un solo hueco (m_1) en las respectivas redes y $m_1^0 \equiv m_1(\Delta t = 0)$

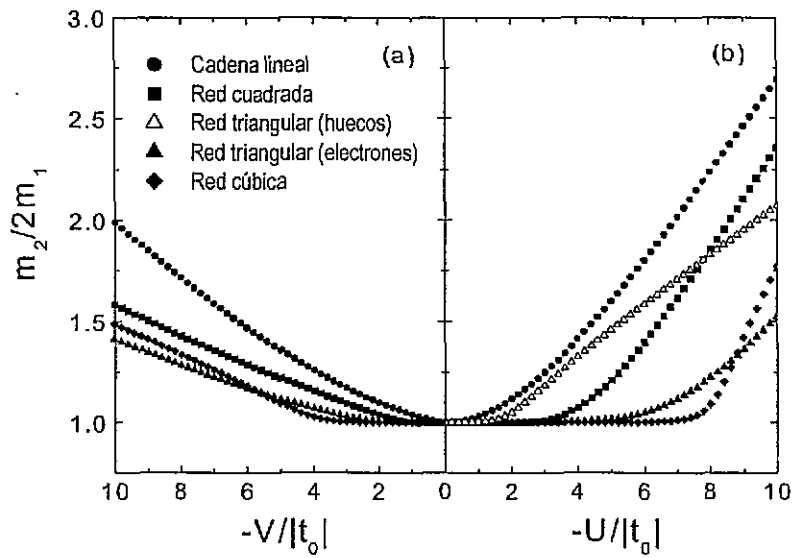


Figura 3.8. Masas efectivas de los estados singletes apareados (m_2) como función de (a) V con $\Delta t = U = 0$ y como función de (b) U para $\Delta t = V = 0$.

3.3 Análisis en el espacio recíproco

A partir de un análisis del problema en el espacio recíproco, es posible obtener una solución analítica para el diagrama de fase del estado base de dos partículas interactuando por medio del hamiltoniano de Hubbard generalizado en cualquier red (Pérez y Wang, 1998a). Para pasar del espacio real al espacio recíproco, se utilizan las siguientes relaciones (Mahan, 1990)

$$\begin{aligned} h_{i,\sigma}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} h_{\mathbf{k},\sigma}^+, \\ h_{i,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} h_{\mathbf{k},\sigma}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

donde N_s es el número de sitios en la red. Sustituyendo estas relaciones en (1.25) se obtiene el hamiltoniano de Hubbard generalizado en el espacio recíproco (ver Apéndice A)

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) h_{\mathbf{k}\sigma}^+ h_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} h_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^+ h_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^+ h_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} h_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\uparrow} \\ &\quad + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\sigma} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} h_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ h_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^+ h_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma} h_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

donde

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} = U + \frac{V}{t} \epsilon(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \frac{\Delta t}{t} [\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \epsilon(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \epsilon(-\mathbf{k}' + \mathbf{q})], \quad (3.25)$$

y

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} = \frac{V}{2t} \epsilon(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (3.26)$$

donde $2\mathbf{q}$ es el vector de onda del centro de masa del par, $\epsilon(\mathbf{k}) = t \sum_{\gamma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{\gamma}}$, siendo \mathbf{R}_{γ} un vector que une a cada sitio i con uno de sus Z sitios vecinos ($\gamma = 1, 2, \dots, Z$), y $t = t_0 - 2\Delta t$.

Como estamos interesados en el estado base, consideraremos la función de onda de un singulete de huecos con momento total cero ($\mathbf{q} = 0$)

$$|\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) h_{\mathbf{k}\uparrow}^+ h_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ |0\rangle. \quad (3.27)$$

Aquí $f(\mathbf{k})$ es la probabilidad de encontrar a un hueco con momento \mathbf{k} cuando el otro

hueco tiene momento $-\mathbf{k}$. La transformada de Fourier de esta función

$$f_l = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} f(\mathbf{k}). \quad (3.28)$$

es la función de onda en el espacio real de la coordenada relativa del par.

El resultado de formular la ecuación de Schrödinger, $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, con H y $|\psi\rangle$ dados por las Ecs. (3.24) y (3.27) es

$$[E - 2\epsilon(\mathbf{k})]f(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} f(\mathbf{k}') \left[U + \left(\frac{V}{t}\right) \epsilon(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + 2\left(\frac{\Delta t}{t}\right) (\epsilon(\mathbf{k}) + \epsilon(\mathbf{k}')) \right]. \quad (3.29)$$

Puesto que $f(\mathbf{k}) = f(-\mathbf{k})$ (singulete) y considerando que para un estado con simetría s las amplitudes f_l tienen el mismo valor para los sitios \mathbf{R}_l primeros vecinos de \mathbf{R}_0 , la Ec. (3.29) se reduce a

$$f(\mathbf{k}) = \frac{1}{(E - 2\epsilon(\mathbf{k}))} \left[\left(U + \frac{2\Delta t \epsilon(\mathbf{k})}{t} \right) f_0 + \left(\frac{V\epsilon(\mathbf{k})}{t} f_1 + 2Z\Delta t \right) f_1 \right]. \quad (3.30)$$

Multiplicando ambos lados de esta última ecuación por $\frac{[\epsilon(\mathbf{k})]^i}{N}$, $i = 0, 1$ y sumando sobre \mathbf{k} , obtenemos, para el caso de una función de onda con simetría s , dos ecuaciones con dos incógnitas, f_0 y f_1

$$\begin{aligned} \left[1 + \frac{U}{2|E_0|} G_0(\rho) - \frac{\Delta t}{t} G_1(\rho) \right] f_0 + \left[\frac{Z\Delta t}{|E_0|} G_0(\rho) - \frac{V}{2t} G_1(\rho) \right] f_1 &= 0 \\ \left[\frac{\Delta t |E_0|}{t} G_2(\rho) - \frac{U}{2} G_1(\rho) \right] f_0 + \left[Zt + \frac{V|E_0|}{2t} G_2(\rho) - Z\Delta t G_1(\rho) \right] f_1 &= 0, \end{aligned} \quad (3.31)$$

donde Z es el número de coordinación de la red, $|E_0|$ es la energía del estado base de una sola partícula y

$$G_i(\rho) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{(\gamma_{\mathbf{k}'})^i}{1 + \rho - \gamma_{\mathbf{k}'}}. \quad (3.32)$$

En esta ecuación, $\gamma_{\mathbf{k}'} = -\epsilon(\mathbf{k}')/|E_0|$ y $\rho = -(1 + E/2|E_0|)$ es la energía de amarre normalizada del par. Para E menor que $-2|E_0|$ existe un estado apareado con energía de amarre $\Delta_2 = 2|E_0|\rho$. Nótese que para redes bipartitas, $|E_0| = Z|t|$, mientras que para redes no bipartitas como la triangular y la cúbica centrada en las caras, dicho valor difiere cuando consideramos huecos en vez de electrones. La energía de amarre está determinada por la condición de que el determinante del sistema de ecuaciones (3.31)

sea cero, es decir

$$G_0(\rho) \left[\frac{V|E_0|}{2t} (1 + \rho)^2 + \left(\frac{UV}{4t} - 2Z\Delta t - \frac{Z\Delta t^2}{t} \right) (1 + \rho) + \frac{ZUt}{2|E_0|} \right] + Zt \left(1 + \frac{\Delta t}{t} \right)^2 - \frac{V|E_0|}{2t} (1 + \rho) - \frac{UV}{4t} = 0. \quad (3.33)$$

donde se utilizó el hecho de que $G_1(\rho)$ y $G_2(\rho)$ están relacionadas con $G_0(\rho)$ de la siguiente forma (Marsiglio y Hirsch, 1990b)

$$\begin{aligned} G_1(\rho) &= (1 + \rho)G_0(\rho) - 1, \\ G_2(\rho) &= (1 + \rho)^2 G_0(\rho) - (1 + \rho). \end{aligned} \quad (3.34)$$

La ecuación (3.33) da, de manera implícita, la energía de amarre normalizada, ρ , como función de U , V y Δt . Cabe mencionar que en el caso de dos partículas en una dimensión puede obtenerse la energía de amarre de manera explícita (ver Apéndice B). Haciendo $\rho = 0$ en la ecuación (3.33), obtenemos la curva del diagrama de fase entre estados apareados y estados no apareados. Para redes de una y dos dimensiones $G_0(\rho \rightarrow 0) \rightarrow \infty$ (Mattis, 1985) y, por lo tanto, la relación (3.33) se reduce a

$$U(\Delta t, V) = 2|E_0| \frac{2Z(\Delta t^2 + 2t\Delta t) - V|E_0|}{V|E_0| + 2Zt^2} \quad (3.35)$$

Asimismo, para redes tridimensionales, $G_0(0) < \infty$ y el diagrama de fase está dado por

$$U(\Delta t, V) = 2|E_0| \frac{V|E_0| - 4Z(t + \Delta t)^2 + G_0(0)[2Z(\Delta t^2 + 2t\Delta t) - V|E_0|]}{G_0(0)[V|E_0| + 2Zt^2] - V|E_0|} \quad (3.36)$$

En particular, para la red cúbica simple $G_0(0) \simeq 1.51638$. Los intervalos de apareamiento mostrados en la figura 3.6(a) pueden obtenerse de las ecuaciones (3.35) y (3.36) al evaluarlas para $U = V = 0$. Cabe mencionar que el apareamiento de electrones requiere $\Delta t > 2t_0$ para redes de una y dos dimensiones, mientras que para una red cúbica simple se necesita $\Delta t > 2.7136t_0$. Estos valores se obtienen de las ecuaciones (3.35) y (3.36) reemplazando t por $-t_0$ y evaluando para $U = V = 0$.

Los diagramas de fase del estado base de un par de huecos en un estado singulete para una cadena lineal, una red cuadrada, una red triangular y una red cúbica simple se muestran en las figuras 3.8(a), 3.8(b), 3.8(c), y 3.8(d), respectivamente, para $\Delta t = 0$ (círculos abiertos), $0.2t_0$ (triángulos abiertos), $0.5t_0$ (diamantes abiertos), y $0.6t_0$ (cuadrados abiertos). En primer lugar se pueden observar las líneas de transición hiperbólicas para $\Delta t = 0.5t_0$, lo cual indica que hay apareamiento de huecos

aún cuando U ó V son muy grandes, como lo muestran las ecuaciones (3.35) y (3.33). Asimismo, se puede notar que la región de apareamiento se incrementa cuando Δt va de 0 a $0.5t_0$. Sin embargo, un proceso inverso ocurre cuando Δt es mayor que $0.5t_0$, en concordancia con la figura 3.6(a). Finalmente, puede observarse que las líneas de transición para $\Delta t = 0$ (círculos abiertos) en sistemas de una y dos dimensiones pasan por el origen, en contraste con la menor región de apareamiento en el caso tridimensional, es decir, la baja dimensionalidad del sistema en general refuerza el proceso de apareamiento. Esto se debe a que la localización de los estados correlacionados en el espacio equivalente de una partícula en un espacio de mayor dimensión incrementa la energía cinética del sistema (confinamiento cuántico) y entonces, la existencia de pares implica que la energía potencial originada por las “impurezas” debe superar el mencionado incremento de energía cinética. En esta competencia de energías, la dimensionalidad juega un papel crucial (Economou, 1983).

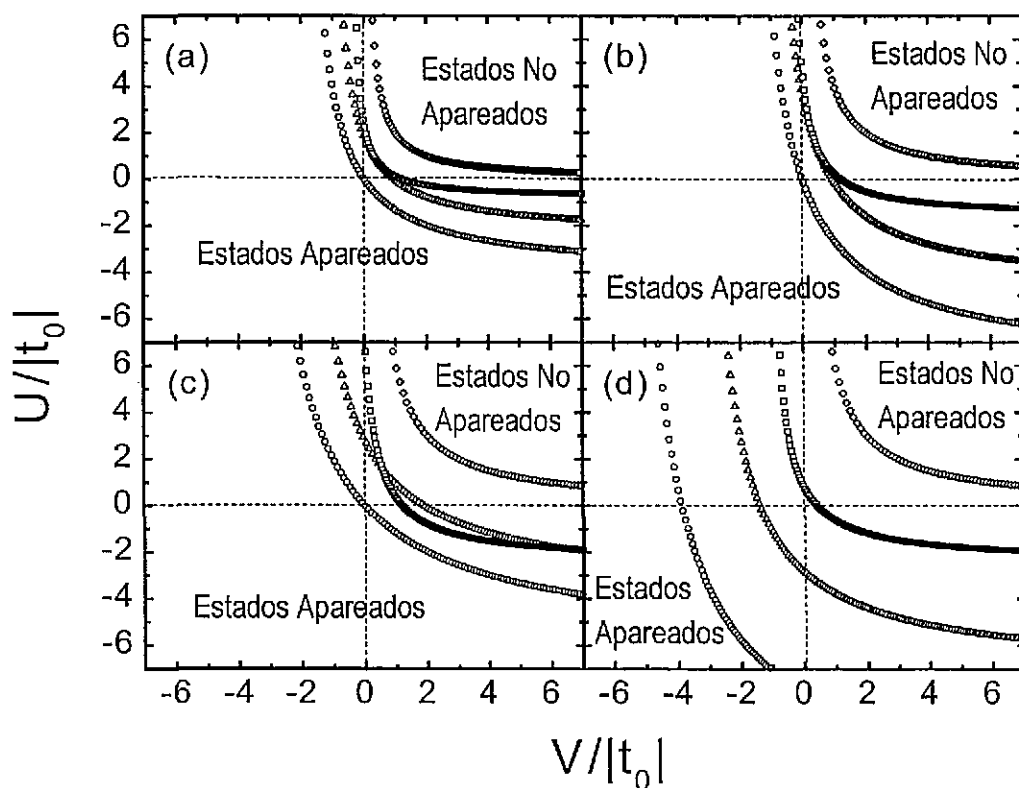


Figura 3.8. Diagramas de fase del estado base de un singlete de huecos en una (a) cadena lineal, (b) red cuadrada, (c) red triangular y (d) una red cúbica simple, donde los valores de Δt son 0 (círculos abiertos), $0.2t_0$ (triángulos abiertos), $0.5t_0$ (diamantes abiertos) y $0.6t_0$ (cuadrados abiertos).

En resumen hemos mostrado que dentro del modelo de Hubbard generalizado existe apareamiento entre huecos para valores pequeños de Δt . Además, estos estados

apareados no son sensibles a la repulsión intra-atómica U . Sin embargo, como se aprecia en la figura 3.8, estos estados son sensibles a la interacción inter-atómica y la región de apareamiento (para valores positivos de U y V) disminuye cuando V se incrementa. Aún así para valores relativamente altos de V ($\simeq 5t_0$) existe una pequeña región donde existen estados apareados.

Estos hechos podrían ser relevantes para el proceso de apareamiento de huecos en algunos sistemas reales, incluyendo materiales superconductores de alta T_c para los cuales se ha estimado que $\Delta t \sim 0.5t_0$ (Appel, *et al.*, 1993).

Capítulo 4

Pares con Simetría d

Los experimentos que miden el corrimiento de Knight en los cupratos superconductores indican que la susceptibilidad de espín desaparece a temperatura cero y, por lo tanto, los pares se encuentran en un estado singulete cuya función de onda espacial debe ser par (Scalapino, 1995). Por otra parte, debido a la naturaleza anisotrópica de los cupratos superconductores, se piensa que los estados apareados se encuentran confinados en los planos de CuO_2 , cuya estructura es la de una red cuadrada. El grupo puntual de la red cuadrada (C_{4v}) contiene las siguientes operaciones de simetría: (a) rotación de $\pi/2$ alrededor del eje z , $R_{\pi/2}$, (b) reflexión a través de un eje $[100]$ (x ó y), $I_{x(y)}$, y (c) reflexión a través de un eje a 45° o eje $[110]$, $I_{\pi/4}$. Puesto que para estados con paridad par (*i.e.* singulete) el único eigenvalor permitido de $R_{\pi/2}^2$ es 1 y, en general, el único eigenvalor de $I_{x(y)}^2$ es 1, se sigue que las representaciones irreducibles *pares* del grupo C_{4v} pueden etiquetarse de manera única por los posibles eigenvalores ± 1 , de $R_{\pi/2}$ y $I_{x(y)}$. Cabe mencionar que en este grupo $I_{\pi/4}$ no es independiente. Estas cuatro representaciones corresponden a los estados tetragonales A_{1g} , A_{2g} , B_{1g} , y B_{2g} en notación estándar de teoría de grupos (Inui, *et al.*, 1995), o bien, a los estados s , g , $d_{x^2-y^2}$, d_{xy} en nomenclatura de funciones de onda (Annett, *et al.*, 1995). Estos cuatro posibles estados se muestran en la tabla 3.1 y se transforman bajo las operaciones de simetría anteriores como la identidad, $xy(x^2 - y^2)$, $x^2 - y^2$ y xy , respectivamente. Nótese que no aparecen los estados que transforman como xz ó yz debido a que solamente consideramos una red cuadrada en vez de un cristal tetragonal.

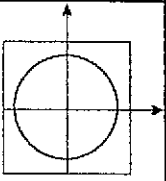
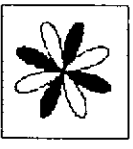
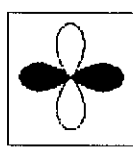
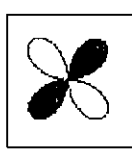
Notación de teoría de grupos	A_{1g}	A_{2g}	B_{1g}	B_{2g}
Función base	constante	$xy(x^2 - y^2)$	$x^2 - y^2$	xy
Nombre de la función de onda	onda s	g	$d_{x^2-y^2}$	d_{xy}
Esquema de de la función base				

Tabla 4.1 Las cuatro posibles representaciones irreducibles de singuletes en una red cuadrada (Annett, *et al.*, 1995). Las regiones sombreadas indican un cambio de signo con respecto a las regiones claras.

Ahora bien, durante los últimos ocho años ha habido una serie de experimentos, tales como los de espectroscopía de fotoemisión con resolución de ángulo (Ding, *et al.* 1994) y de efecto Josephson (Wollman, *et al.*, 1993; Tsuei *et al.*, 1994), que han

detectado una simetría de apareamiento $d_{x^2-y^2}$ en la mayoría de los cupratos superconductores (Tsuei y Kirtley, 2000). Estas observaciones han impulsado a los teóricos a buscar mecanismos exóticos que den lugar a este tipo de apareamiento. Sin embargo, es posible que algunos términos de la interacción coulombiana que usualmente son despreciados en el modelo de Hubbard, puedan dar lugar a la formación de pares con simetría $d_{x^2-y^2}$ como veremos en este capítulo.

4.1 Interacción de carga-enlace a segundos vecinos

Como hemos visto, la inclusión de Δt en el modelo de Hubbard permite la formación de singletes de huecos sin necesidad de interacciones densidad-densidad atractivas. Sin embargo, la simetría de dichos pares es s anisotrópica. En este capítulo consideraremos, además de las interacciones U , V , y Δt , la interacción de carga-enlace a segundos vecinos $\Delta t_3 \equiv \langle i|v|lj \rangle$, donde l es primer vecino tanto de i como de j , siendo i y j segundos vecinos. Ciertamente, todas estas interacciones están presentes en un sólido real, aún cuando sus contribuciones pueden ser muy diferentes, por ejemplo, para los electrones $3d$ en los metales de transición U , V , Δt , y Δt_3 son típicamente del orden de 20, 3, 0.5, y 0.1 eV, respectivamente (Hubbard, 1963; Appel, *et al.*, 1992). Incluyendo todos estos términos, obtenemos el siguiente hamiltoniano de Hubbard generalizado (Pérez y Wang, 2001) para una sola banda s

$$\begin{aligned}
H = & -t_0 \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} - t'_0 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j + \\
& + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} (n_{i,-\sigma} + n_{j,-\sigma}) + \Delta t_3 \sum_{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle, \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} n_l, \quad (4.1)
\end{aligned}$$

donde $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ denota segundos vecinos. Por consistencia hemos considerado también el salto $t_{ij} = -t'_0$, con i,j segundos vecinos. En este caso, t_0 y t'_0 son cantidades positivas. Realizando una transformación electrón-hueco en la ecuación (4.1) por medio de $c_{i,\sigma}^+ \rightarrow h_{i,\sigma}$, el hamiltoniano queda como

$$\begin{aligned}
H = & (U + 2ZV)(N_s - \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma}^h) + (t_0 - 2\Delta t) \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^+ h_{j,\sigma} \\
& + (t'_0 - 4\Delta t_3) \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^+ h_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow}^h n_{i,\downarrow}^h + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i^h n_j^h \\
& + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^+ h_{j,\sigma} (n_{i,-\sigma}^h + n_{j,-\sigma}^h) \\
& + \Delta t_3 \sum_{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle, \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^+ h_{j,\sigma} n_l^h, \quad (4.2)
\end{aligned}$$

donde $n_{i,\sigma}^h = h_{i,\sigma}^+ h_{i,\sigma}$, $n_i^h = n_{i,\uparrow}^h + n_{i,\downarrow}^h$, N_s es el número total de sitios, y Z es el número de coordinación de la red. El primer término en la ecuación (4.2) solamente contribuye a un corrimiento en la energía total y en consecuencia, los huecos también interaccionan a través de un hamiltoniano de Hubbard generalizado pero con parámetros de salto efectivos $t = t_0 - 2\Delta t$ y $t' = t'_0 - 4\Delta t_3$, en vez de $-t_0$ y $-t'_0$ para electrones.

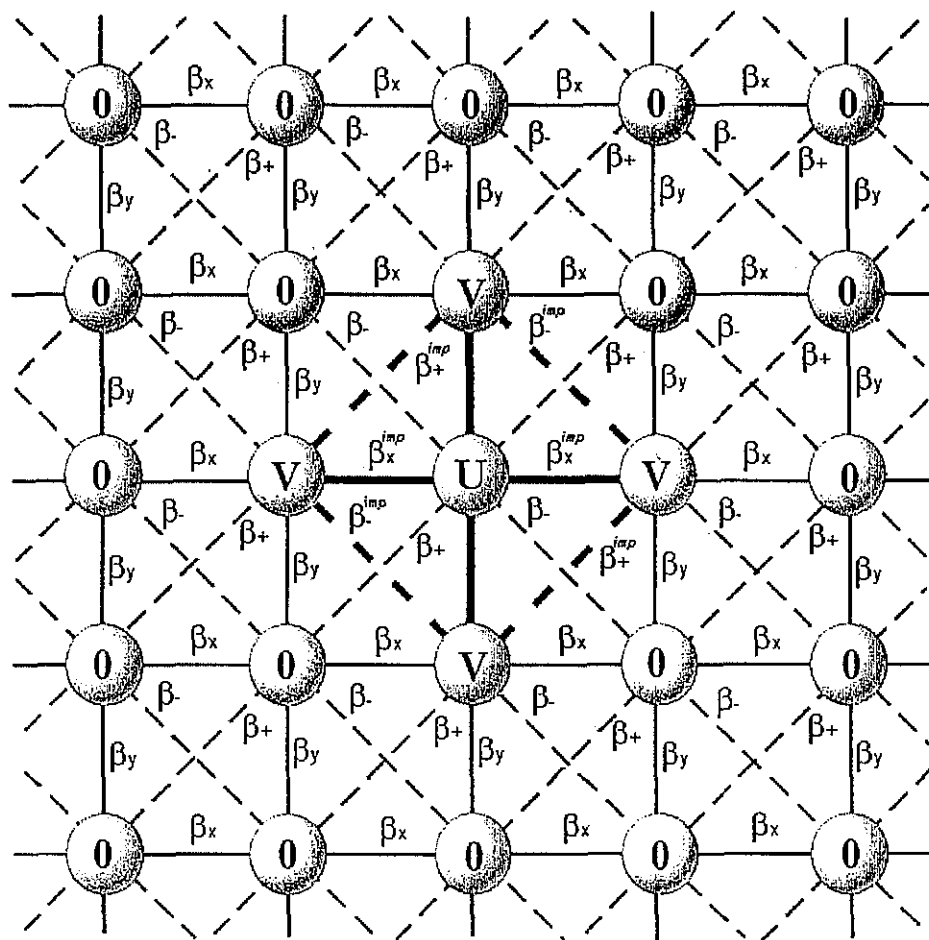


Figura 4.1. Representación esquemática de los estados mapeados (círculos) de dos partículas en una red cuadrada. Las autoenergías se muestran dentro de los círculos, y los parámetros de salto entre dichos estados $\beta_{x(y)}$, β_{\pm} , $\beta_{x(y)}^{imp}$, y β_{\pm}^{imp} están indicados por líneas delgadas continuas, líneas delgadas punteadas, líneas gruesas continuas y líneas gruesas punteadas, respectivamente.

Cuando se considera la interacción de carga-enlace a segundos vecinos, el método del espacio de estados introducido en el capítulo anterior debe modificarse. Para el caso de dos huecos en una red cuadrada (figura 4.1) los parámetros de salto proyectados β_x , β_y , β_{\pm} , β_x^{imp} , β_y^{imp} , y β_{\pm}^{imp} están dados respectivamente por $2t \cos(K_x a/2)$,

$2t \cos(K_y a/2)$, $2t' \cos([K_x \pm K_y] a/2)$, $2t_{imp} \cos(K_x a/2)$, $2t_{imp} \cos(K_y a/2)$, y $2t_3 \cos([K_x \pm K_y] a/2)$, donde $t_{imp} = t + \Delta t$, $t_3 = t' + \Delta t_3$, (K_x, K_y) es el vector de onda del centro de masa del par y a es la constante de red. Nótese que el valor de los parámetros de salto efectivos, β_x^{imp} , β_y^{imp} , y β_{\pm}^{imp} , entre los estados de impureza (con auto energías U o V) se incrementan al sumarles Δt , Δt , y Δt_3 , respectivamente, pues las interacciones de carga-enlace tienen contribuciones únicamente en los saltos entre sitios cercanos a aquellos ocupados por la otra partícula.

4.2 Diagramas de fase

Como vimos en el capítulo anterior, el apareamiento entre electrones con $U = V = \Delta t_3 = 0$ requiere $\Delta t > 2t_0$ para los sistemas de una y dos dimensiones lo cual claramente excede los valores estimados de Δt (Hubbard, 1963), y por lo tanto en este capítulo solamente analizaremos el apareamiento de huecos con detalle (Pérez y Wang, 2001).

Los diagramas de fase del estado base correspondiente a un singulete de huecos que se muestran en las figuras 4.2(a), 4.2(b), y 4.2(c) están calculados para $U = 0$, $U = 2t_0$, y $U = 5t_0$, respectivamente, todos con $V = 0$ y $t'_0 = 0.45t_0$ como sugieren J. Yu, *et al.* (1988). Los cálculos numéricos fueron realizados en una red cuadrada truncada (ver figura 4.1) de 2401 estados proyectados de dos partículas. Como siempre, el tamaño de la red proyectada usado para el cálculo numérico se escoge como el mínimo tamaño a partir del cual las cantidades físicas no tienen variación importante con el tamaño de la red. Asimismo, la frontera entre estados apareados y no apareados está dada por la condición de que la energía de amarre del par se anule ($\Delta_2 = 0$), mientras que la frontera entre estados con simetría s y estados con simetría d se calcula a partir de la condición $\Delta_2^s = \Delta_2^d$, donde el superíndice s (d) denota a un estado con simetría s (d). Nótese que para $U = 0$ no hay apareamiento con simetría d , y conforme se incrementa la repulsión coulombiana U la zona con apareamiento $d_{x^2-y^2}$ crece. Para $U = 10t_0$ el apareamiento con simetría s desaparece prácticamente. Esto resulta natural pues la repulsión coulombiana intra-sitio inhibe la formación de pares con simetría s y no afecta a los pares con simetría d , favoreciendo así un estado base apareado con simetría $d_{x^2-y^2}$. Más aún, el apareamiento con simetría $d_{x^2-y^2}$ requiere que $\Delta t_3 > 0$, sin importar cuán pequeño sea este valor en concordancia con el hecho de que la interacción de carga-enlace Δt por si sola solo da lugar a apareamiento con simetría s extendida (Hirsch, 1989).

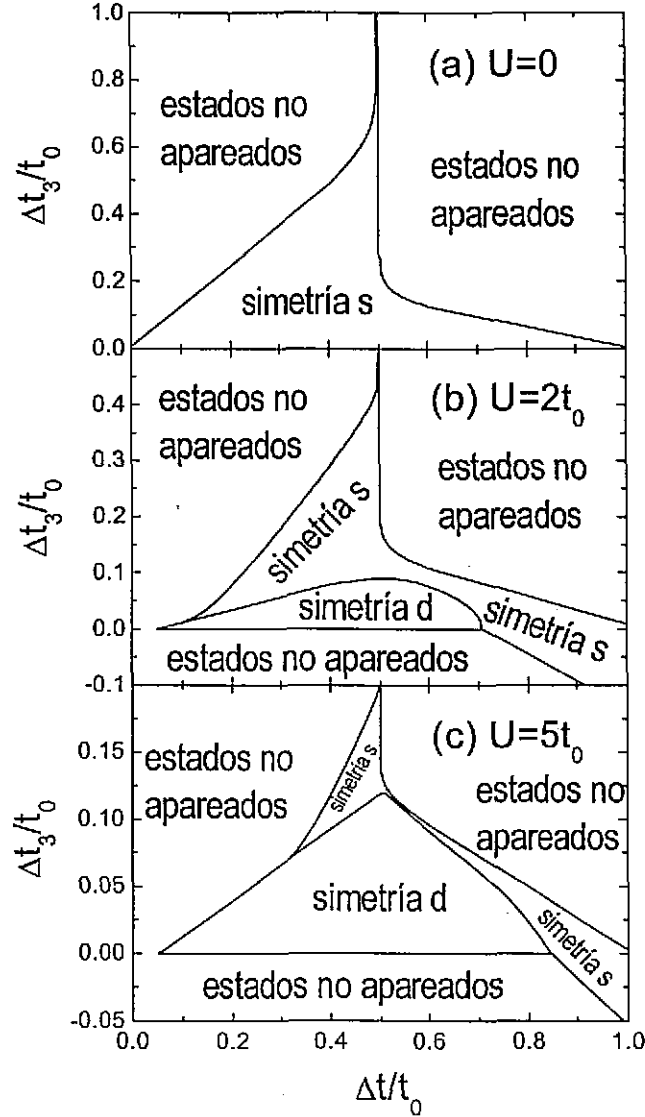


Figura 4.2. Diagramas de fase del estado base del singlete de huecos en el modelo de Hubbard generalizado con $V = 0$, $t'_0 = 0.45t_0$, y (a) $U = 0$, (b) $U = 2t_0$, y (c) $U = 5t_0$.

Los efectos de las interacciones coulombianas U y V sobre el proceso de apareamiento de huecos se muestran en la figura 4.3 para $t'_0 = 0.45t_0$, $\Delta t = 0.5t_0$ y $\Delta t_3 = 0.25t'_0$. Nótese que para V negativa, el apareamiento se da esencialmente en el canal d , como fue observado previamente por Nazarenko *et al.* (1996) y Blaer *et al.* (1998). Las líneas de transición de fase entre las zonas con simetría d y sin apareamiento, entre zonas con simetría s y sin apareamiento, y entre zonas con simetría d y con simetría s se encuentran dadas por $V = 4\Delta t_3$, $U = 4t_0^2/(V + 2t'_0)$, y $U = V + t_0^2/t'_0 - 2t'_0$, respectivamente pues para $\Delta t = 0.5t_0$ y $\Delta t_3 = 0.25t'_0$ la red de estados mapeada (figura 4.1) se reduce a una molécula de 5 sitios cuya autoenergías son U y V , y en conse-

cuencia se pueden obtener resultados analíticos. Para Δt y Δt_3 alrededor de $0.5t_0$ y $0.25t'_0$, respectivamente, las características generales de los diagramas de fase $U - V$ son similares a las mostradas en la figura 4.3.

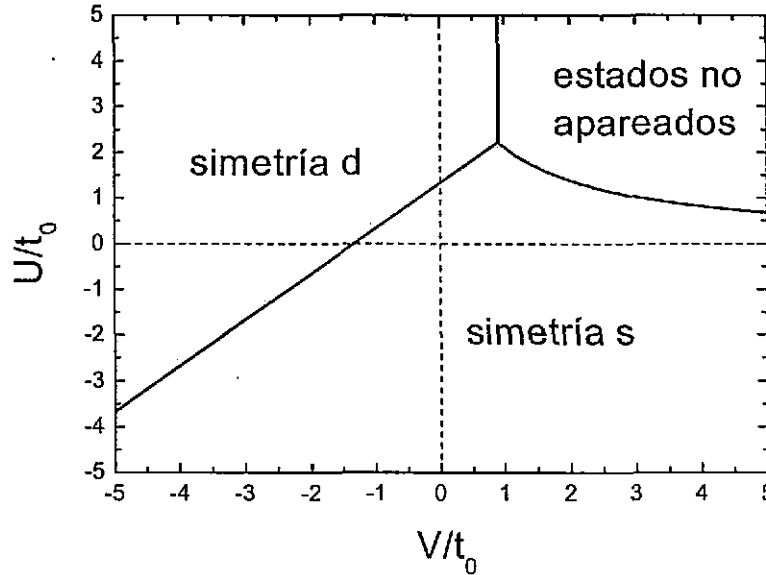


Figura 4.3. Diagrama de fase del estado base del singlete de huecos en el espacio $U - V$, para $t'_0 = 0.45t_0$, $\Delta t = 0.5t_0$ y $\Delta t_3 = 0.25t'_0$.

4.3 Singletes de huecos en un antiferromagneto

En esta sección consideramos una red cuadrada con una sola banda semillena, es decir, un electrón por sitio, en la que se encuentra un orden antiferromagnético de largo alcance para casi todos los valores de la repulsión coulombiana U (Lin *et al.* 1987, Hirsch *et al.* 1989b). En este fondo antiferromagnético los huecos tienden a moverse dentro de una misma subred para evitar distorsionar el orden de los espines. En consecuencia, como una primera aproximación suponemos que el fondo antiferromagnético permanece estático cuando un singlete de huecos es introducido al sistema aunque existe evidencia de que el orden antiferromagnético es sensible a una densidad finita de huecos (Hirsch, *et al.*, 1989b). En consecuencia, dentro de esta aproximación cada hueco puede moverse solamente en una de las dos subredes del sistema (Nazarenko, *et al.* 1996). Esto es equivalente a remover la subred que contiene el sitio con autoenergía U en la figura 4.1, es decir, los términos $(t_0 - 2\Delta t)$, U y Δt del hamiltoniano de huecos no tienen efectos en este proceso de apareamiento (Pérez y Wang, 2000).

En la figura 4.4 se muestra el diagrama de fase de un singlete de huecos en un fondo antiferromagnético estático. Nótese que los valores de las energías de correlación están expresadas en unidades del parámetro de salto a segundos vecinos (t'_0), en vez de t_0 , siendo $t'_0 < t_0$. Más aún, el estado base con simetría s requiere un valor grande de Δt_3 y

una interacción atractiva a segundos vecinos $V < -4\Delta t_3$, mientras que el apareamiento con simetría d necesita de una interacción apantallada a segundos vecinos $V < 4\Delta t_3$ para $\Delta t_3 < 0.25t'_0$, o bien $V < -\frac{12\pi+8}{\pi-2}\Delta t_3 + \frac{4\pi}{\pi-2}t'_0$ para $0.25t'_0 \leq \Delta t_3 \leq \frac{\pi}{2\pi+4}t'_0$.

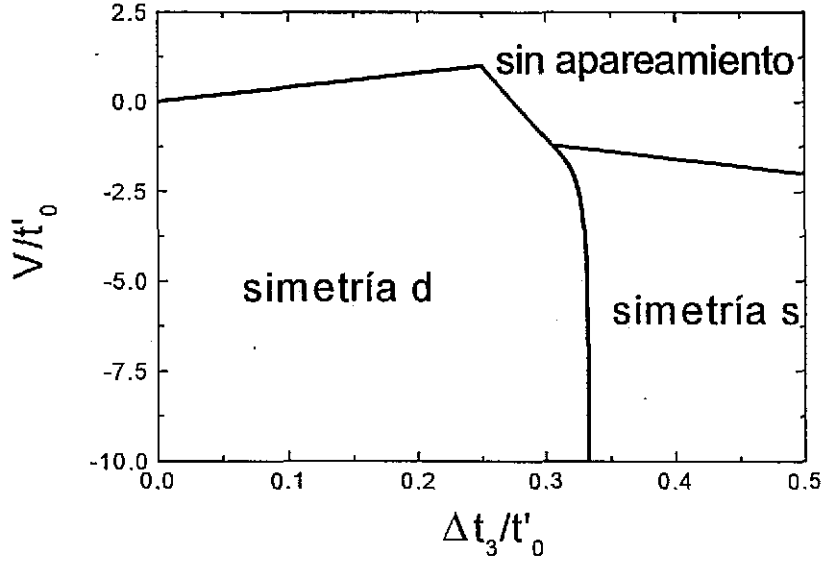


Figura 4.4. Diagrama de fase del estado base de un singulete de huecos en un antiferromagneto para U y Δt arbitrarias.

Las figuras 4.5(a), 4.5(b) y 4.5(c) muestran, respectivamente, la energía de amarre (Δ_2), la longitud de coherencia (ξ) y la masa efectiva (m_2) de un singulete de huecos con simetría d en un antiferromagneto (cuadrados sólidos), en comparación con singuletes con simetría s (círculos abiertos) y simetría d (cuadrados abiertos) sin fondo antiferromagnético.

De la figura 4.5(a) puede notarse que el fondo antiferromagnético fortalece el apareamiento con simetría d . Asimismo puede observarse que, en general, una longitud de coherencia pequeña está asociada con una energía de amarre mayor como ocurre en la teoría BCS. Sin embargo, los pares con simetría d en un antiferromagneto aunque tienen una mayor energía de amarre en comparación con los pares con simetría s , no poseen una longitud de coherencia más pequeña alrededor $\Delta t_3 = 0.225t'_0$. Este hecho puede ser importante ya que una mayor energía de amarre da lugar a una temperatura de formación de pares mayor y una longitud de coherencia más larga podría ayudar en la condensación de Bose-Einstein (Randeria, 1995). Por otra parte, se observa una reducción significativa del cociente $m_2/2m_1$ en la vecindad de $t = 2t'$, ya que las interacciones de carga-enlace incrementan la movilidad de los pares mientras que la masa efectiva de los huecos sin aparear (m_1) se hace extremadamente grande en esta región, de manera similar a lo que ocurre en los sistemas de Hubbard generalizados con interacciones de carga-enlace a primeros vecinos.

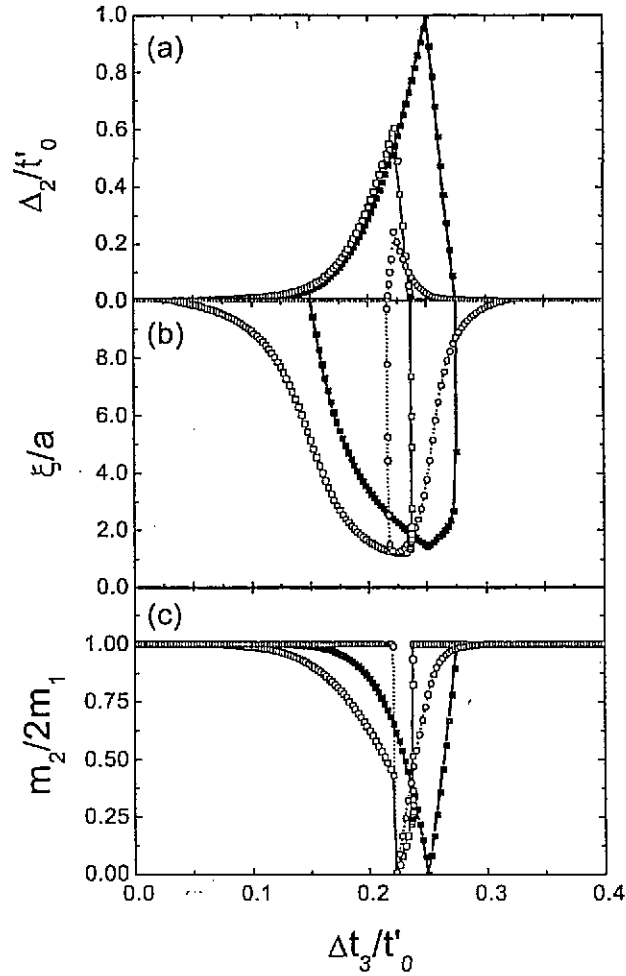


Figura 4.5. (a) La energía de amarre, (b) la longitud de coherencia y (c) la masa efectiva de los singletes de huecos con simetría s (círculos abiertos) y simetría d (cuadrados abiertos) para $U = 5t_0, V = 0, t'_0 = 0.45t_0$, y $\Delta t = 0.45t_0$ en comparación con los singletes de huecos con simetría d en un antiferromagneto (cuadrados sólidos) para $V = 0$ y U y Δt arbitrarias.

En los últimos dos capítulos hemos analizado las condiciones bajo las cuales se forman pares de huecos, tanto con simetría s como con simetría d , dentro del hamiltoniano de Hubbard generalizado. Por otro lado, la superconductividad consiste en la formación de un condensado de dichos pares, es decir, es un fenómeno que involucra un gran número de partículas cuánticas interactuantes, para el cual no existe solución exacta en forma general. Una manera estándar de abordar este fenómeno es el formalismo BCS (Bardeen, *et. al.*, 1957), como se mostró en el capítulo dos. En el siguiente capítulo investigaremos el estado superconductor con simetría d a partir del modelo de Hubbard.

Capítulo 5

Superconductividad Anisotrópica

En general, los cupratos superconductores se caracterizan por tener la constante de red a lo largo del eje cristalográfico c perpendicular a los planos de CuO_2 mayor que la constante de red a lo largo del eje a , entre 3 y 8 veces mayor dependiendo del compuesto en particular (Tsuei y Kirtley, 2000). En la representación del espacio k , esta anisotropía se traduce en una primera zona de Brillouin muy plana que posee las propiedades de simetría básicas correspondientes a la celda unitaria de una red cuadrada o rectangular. De hecho, los resultados de los cálculos de estructura de bandas para muchos cupratos muestran bandas de energía que surgen predominantemente de los planos de CuO_2 , con poca dispersión en la dirección c (Pickett, 1989; Shen, *et al.*, 1995; Andersen, *et al.*, 1995, Rubio-Ponce y Baquero, 2001). La bidimensionalidad de las bandas de energía se manifiesta en varias propiedades del estado normal y superconductor. Por ejemplo, la resistividad a temperatura ambiente a lo largo del eje c es mucho mayor que la resistividad medida a lo largo de los planos. En el caso del $YBCO$ es de 30-100 veces mayor mientras que en el Bi-2212 es 10^5 mayor (Poole, *et al.*, 1995; Ong, *et al.*, 1996). Asimismo, en el estado superconductor las longitudes de penetración y de coherencia son mucho mayores en los planos que en la dirección perpendicular a ellos (Jannossy *et al.*, 1990; Chien *et al.*, 1994). Por último investigaciones en el transporte eléctrico a lo largo del eje c proveen fuerte evidencia para el confinamiento de carga en las capas de CuO_2 (Uchida, *et al.*, 1994; Clarke *et al.*, 1995; Tajima *et al.*, 1997; Yurgens *et al.*, 1997; Kitano *et al.*, 1998). Por lo tanto, la evidencia experimental indica que la superconductividad en los cupratos se origina básicamente en los planos CuO_2 . En consecuencia la simetría de la brecha superconductora debe ser compatible con las simetrías de la red cuadrada, como se muestra en la tabla 3.1.

La simetría de la brecha superconductora es una propiedad central del estado superconductor ya que está relacionada con la simetría del potencial de interacción que da lugar a la formación de pares. Varios estudios experimentales tales como la dependencia del calor específico con la temperatura, conductividad térmica (Revaz, *et al.*, 1998; Wright, *et al.*, 1999) espectroscopía de fotoemisión con resolución angular (Shen, *et al.*, 1993; Ma, *et al.*, 1995; Shen y Dessau, 1995; Ding, *et al.*, 1996), dispersión Raman (Devereaux, *et al.*, 1994, 1995) y resonancia magnética nuclear (Walsdet y Warren, 1990) sugieren que la brecha superconductora tiene simetría $d_{x^2-y^2}$ pero quizás los experimentos más decisivos han sido los que prueban los aspectos macrocópicos de la función de onda superconductora como lo son la cuantización del flujo magnético y el efecto Josephson (Wollman, *et al.*, 1993; Tsuei, *et al.*, 1994). Si en un superconductor en forma de anillo fluye una corriente persistente, el flujo de campo magnético a través del anillo toma valores que son múltiplos enteros del cuanto de flujo magnéti-

co ($hc/2e = 2 \times 10^{-7}$ Gauss/cm²). El efecto Josephson de corriente directa consiste en que una corriente puede fluir a través de una unión de dos superconductores distintos o bien, dos superconductores cualesquiera separados por una delgada capa de metal normal o material aislante, sin ningún voltaje aplicado. Esta corriente está determinada por la diferencia de fase (δ) de la función de onda en cada superconductor: $j = j_0 \sin(\delta)$, y se debe al tunelaje de pares de Cooper a través de la barrera de potencial (Josephson, 1962). Ahora bien, en un circuito formado por junturas Josephson las corrientes superconductoras interfieren y esta interferencia se puede modular mediante un campo magnético externo. Basados en la relación de Josephson entre densidad de supercorriente y la diferencia de fase de la función de onda entre dos superconductores débilmente acoplados, puede obtenerse información acerca de esta fase en los cupratos superconductores. En un conjunto de experimentos, un cristal superconductor se conecta alrededor de una esquina por medio de un superconductor convencional con simetría s , de tal forma que se compara la fase en la dirección x con aquella de la dirección y del cuprato, encontrándose una diferencia de fase de π . El efecto de esto es que ahora el flujo encerrado será un número semientero de cuantos de flujo magnético (Wollman, *et al.*, 1993). Usando una idea similar, anillos superconductores fueron crecidos litográficamente en películas delgadas que contienen dos o tres junturas Josephson entre las películas superconductoras con un alineamiento cristalino bien definido. La estrategia de estos experimentos consiste en crear un anillo con dos o tres juntas Josephson con cristales superconductores con direcciones cristalográficas perfectamente definidas. Para este fin se usaron sustratos tricristalinos de titanato de estroncio ($SrTiO_3$). Sobre este sustrato se depositaron películas delgadas de cupratos superconductores formando un anillo interrumpido por tres fronteras de grano que hacen las veces de junturas Josephson. Como se esperaría de la minimización de la energía libre en un anillo con tres juntas y como una sorprendente manifestación del estado cuántico macroscópico, una corriente espontánea fluye alrededor del anillo aún en la ausencia de un campo magnético aplicado (Tsuei, *et al.*, 1994). El flujo magnético creado por esta corriente es $\phi_0/2$, la mitad del flujo asociado con un vórtice ordinario. Este es el resultado esperado para un material cuya brecha superconductora tiene simetría $d_{x^2-y^2}$, es decir, en el espacio k tiene la forma funcional

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_d [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)] \quad (5.1)$$

donde a es el parámetro de red de los planos CuO_2 y Δ_d una función que contiene la dependencia de la brecha con la temperatura. Esta brecha superconductora es máxima a lo largo de k_x y k_y , con nodos en las direcciones $k_x = \pm k_y$ y con signos opuestos en las regiones separadas por los nodos. Este tipo de simetría se espera de una fuerte repulsión intra-atómica pero no permite discriminar entre distintos mecanismos microscópicos para el apareamiento. Entre los compuestos que presentan brecha superconductora con simetría d podemos mencionar $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, $GdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, $Tl_2Ba_2CuO_{6+\delta}$, $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ (Tsuei y Kirtley, 2000).

5.1 Simetría de la brecha superconductora

De la discusión de la teoría BCS en el capítulo dos, recordemos que la brecha de energía en el estado k se definió de manera autoconsistente en términos de la ocupación de pares de todos los estados k' como

$$\Delta_k \propto \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle \propto - \sum_{k'} V_{kk'} \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle . \quad (5.2)$$

En la teoría original de BCS, se supone un sistema isotrópico de tal manera que Δ_k era independiente de k , y debido a la simetría esférica, esto se conoce como apareamiento con simetría s . Sin embargo, si el material es anisotrópico entonces se esperaría que Δ_k como función del vector de onda k tuviera la misma simetría que el cristal. Por ejemplo, un cristal tetragonal generalmente tendrá una brecha diferente para k , a lo largo del eje c que para k , a lo largo del eje a o del eje b . La variación de Δ_k en direcciones intermedias no es necesariamente simple, pero la simetría no puede ser más baja que la tetragonal. A esta situación se le conoce como apareamiento de onda s anisotrópico ya que carece de simetría esférica pero tiene la simetría del cristal. El término “apareamiento no convencional” se refiere a la situación en la que la simetría de la brecha energética Δ_k es menor que la del cristal.

La brecha superconductora Δ_k es el parámetro de orden de la transición superconductora en la teoría fenomenológica de Ginzburg-Landau. Por otro lado, de la ecuación (2.25) vemos que a baja densidad de partículas la transformada de Fourier de la parte espacial de la función de onda del par $\phi(\mathbf{r})$ es proporcional a la brecha superconductora

$$\phi(\mathbf{k}) = \frac{\Delta_k}{E_k}, \quad (5.3)$$

y en general la brecha tiene la misma simetría que $\phi(\mathbf{k})$; hecho que se verificará en este capítulo.

5.2 Ecuaciones BCS para el modelo de Hubbard

Consideraremos un cristal tetragonal, esto es, un cristal formado por redes cuadradas en el plano xy con un parámetro de red a y separadas por una distancia a_{\perp} . Un hamiltoniano de Hubbard generalizado de una sola banda para este sistema puede escribirse como (Pérez y Wang, 2002a)

$$H = -t_{\perp} \sum_{\langle m,n \rangle, \sigma} c_{m,\sigma}^{\dagger} c_{n,\sigma} + H_{2D} \quad (5.4)$$

donde $c_{m,\sigma}^{\dagger}$ ($c_{m,\sigma}$) es el operador de creación (aniquilación) de un electrón con espín $\sigma = \downarrow$ $\sigma = \uparrow$ en el sitio m , $\langle m, n \rangle$ denota sitios que son primeros vecinos en dos

planos adyacentes y H_{2D} está dado por la ecuación (4.1). Nótese que únicamente consideramos interacciones electrón-electrón en el mismo plano, ya que suponemos que el parámetro de salto entre planos (t_{\perp}) solamente proporciona un pequeño acoplamiento entre los mismos, pero el mecanismo de apareamiento reside en el plano CuO_2 . Si hacemos una transformación electrón-hueco en la ecuación (5.4), es decir, los operadores de electrones son transformados a operadores de huecos por medio de $c_{i,\sigma}^{\dagger} \rightarrow h_{i,\sigma}$, el hamiltoniano puede escribirse entonces como

$$\begin{aligned}
H = & t_{\perp} \sum_{\langle m,n \rangle, \sigma} h_{m,\sigma}^{\dagger} h_{n,\sigma} + (U + 2ZV)(N_s^{\parallel} - \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma}^h) + (t_0 - 2\Delta t) \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^{\dagger} h_{j,\sigma} \\
& + (t'_0 - 2\Delta t_3) \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^{\dagger} h_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow}^h n_{i,\downarrow}^h + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i^h n_j^h \\
& + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^{\dagger} h_{j,\sigma} (n_{i,-\sigma}^h + n_{j,-\sigma}^h) + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} h_{i,\sigma}^{\dagger} h_{j,\sigma} n_l^h, \quad (5.5)
\end{aligned}$$

donde $n_{i,\sigma}^h = h_{i,\sigma}^{\dagger} h_{i,\sigma}$, $n_i^h = n_{i,\uparrow}^h + n_{i,\downarrow}^h$, N_s^{\parallel} es el número total de sitios en cada plano, y Z es el número de coordinación en el plano. El segundo término en la ecuación (5.5) únicamente contribuye a un corrimiento de la energía total y en consecuencia los huecos también interactúan a través de un hamiltoniano de Hubbard generalizado pero con parámetros de enlace efectivos t_{\perp} , $t = t_0 - 2\Delta t$, y $t' = t'_0 - 2\Delta t_3$, en vez de $-t_{\perp}$, $-t_0$ y $-t'_0$ para electrones. El hamiltoniano de huecos [Ec. (5.5)] puede escribirse en el espacio recíproco como (ver Apéndice A)

$$\begin{aligned}
H = & (U+2ZV)N_s^{\parallel} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_0(\mathbf{k}) h_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} h_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} h_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} h_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \uparrow} \\
& + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} h_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} h_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma}, \quad (5.6)
\end{aligned}$$

donde N_s es el número total de sitios,

$$h_{\mathbf{k}, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} h_{j, \sigma},$$

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = 2t_{\perp} \cos(k_z a_{\perp}) - U - 2ZV + 2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a),$$

$$\begin{aligned}
V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} = & U + V \beta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \Delta t [\beta(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \beta(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \beta(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \beta(-\mathbf{k}' + \mathbf{q})] \\
& + \Delta t_3 [\gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}' + \mathbf{q})], \quad (5.7)
\end{aligned}$$

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} = \frac{V}{2} \beta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \Delta t_3 [\gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \gamma(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, -\mathbf{k}' + \mathbf{q})] , \quad (5.8)$$

$$\beta(\mathbf{k}) = 2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] , \quad (5.9)$$

$$\gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 4 \cos(k_x a) \cos(k'_y a) + 4 \cos(k'_x a) \cos(k_y a) , \quad (5.10)$$

siendo $2\mathbf{q}$ el vector de onda del centro de masa del par. Después de un desacoplamiento normal de Hartree-Fock (Dagotto, *et al.*, 1994b; Arrachea, *et al.*, 1997) de los términos de interacción en la Ec. (5.6) dentro del esquema de BCS estándar, el hamiltoniano reducido puede escribirse como (Tinkham, 1996)

$$H - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) h_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} h_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'0} h_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} h_{-\mathbf{k}', \downarrow} h_{\mathbf{k}', \uparrow} , \quad (5.11)$$

donde μ es el potencial químico, \hat{N} el operador de número y

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = & 2t_{\perp} \cos(k_x a_{\perp}) + \left(\frac{U}{2} + ZV \right) n_h + 2(t + n_h \Delta t) (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \\ & + 4(t' + 2n_h \Delta t_3) \cos(k_x a) \cos(k_y a) , \end{aligned} \quad (5.12)$$

donde n_h es la densidad de huecos por sitio. Nótese que la relación de dispersión $\varepsilon(\mathbf{k})$ se ha modificado al agregar los términos $n_h \Delta t$, $2n_h \Delta t_3$ y $\left(\frac{U}{2} + 4V \right) n_h$ a los parámetros de enlace t , t' y a la autoenergía, respectivamente. Por otra parte, el término $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}$ en la ecuación (5.6) ha sido ignorado ya que no tiene contribución sobre los singuletes. A temperatura finita T , las ecuaciones para determinar la brecha superconductor y el potencial químico son (Hirsch y Marsiglio, 1989),

$$\Delta_k = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'0} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}}{2k_B T} \right) \quad (5.13)$$

$$n_h - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}') - \mu}{E_{\mathbf{k}'}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}}{2k_B T} \right) \quad (5.14)$$

donde la energía de excitación ($E_{\mathbf{k}}$) de una quasipartícula viene dada por

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} . \quad (5.15)$$

Para el modelo de Hubbard con U atractiva analizado dentro del esquema BCS (Micnas, *et al.*, 1990), $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'0} = -U$, y en consecuencia solo se obtiene una brecha superconductor isotrópica de simetría s . Sin embargo en este caso, debido a la na-

turalidad de $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'0}$, las dos últimas ecuaciones admiten soluciones tanto en el canal s como en el canal d , cuyas brechas superconductoras están dadas respectivamente por $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_s + \Delta_{s^*} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$ y $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_d [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]$, donde Δ_s es la contribución al canal s estándar. En consecuencia, para el canal d la Ec. (5.13) puede escribirse como,

$$1 = -\frac{(V - 4\Delta t_3)}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\cos(k_x a) [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T}\right), \quad (5.16)$$

y para el canal s , la Ec. (5.13) se divide en dos ecuaciones acopladas,

$$\Delta_{s^*} = -(V + 4\Delta t_3) (I_2 \Delta_{s^*} + I_1 \Delta_s) - 4\Delta t (I_1 \Delta_{s^*} + I_0 \Delta_s), \quad (5.17)$$

y

$$\Delta_s = -U (I_1 \Delta_{s^*} + I_0 \Delta_s) - 4\Delta t (I_2 \Delta_{s^*} + I_1 \Delta_s), \quad (5.18)$$

donde

$$I_l \equiv \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]^l}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T}\right). \quad (5.19)$$

Nótese que dados n_h y T , las ecuaciones (5.14) y (5.16) tienen que resolverse simultáneamente para μ y Δ_d . Análogamente, las ecuaciones (5.14), (5.17), y (5.18) deben resolverse simultáneamente para μ , Δ_s y Δ_{s^*} . En particular, la T_c está determinada por la condición $\Delta_s(T_c) = \Delta_{s^*}(T_c) = 0$, o bien $\Delta_d(T_c) = 0$. Cabe señalar que dentro del modelo de Hubbard generalizado la condición para la existencia de una brecha superconductoras en el canal d puede obtenerse reescribiendo convenientemente la ecuación (5.16) de la siguiente forma

$$1 = -\frac{(V - 4\Delta t_3)}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2}{\sqrt{(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta_d^2 (\cos k_x a - \cos k_y a)^2}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T}\right). \quad (5.20)$$

donde se ha usado el hecho de que k_x y k_y son variables mudas. Nótese que la suma en la ecuación (5.20) es siempre positiva puesto que $E_{\mathbf{k}} / (2k_B T) > 0$. En consecuencia, la condición necesaria para una solución de Δ_d es $4\Delta t_3 - V > 0$, que coincide con la de un solo par (Pérez y Wang, 2001).

5.3 Estado superconductor con simetría d

En esta sección los estados superconductores con simetría s y d son analizados por medio de la temperatura crítica (T_c), las brechas superconductoras (Δ_s , Δ_{s^*} , or Δ_d), y la energía de excitación de las quasipartículas (Δ_0) que se define como el mínimo valor de $E_{\mathbf{k}}$, dado por la Ec. (5.15), con $\Delta_d [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]$ evaluada en el antinodo (Monthoux, *et al.* 1994).

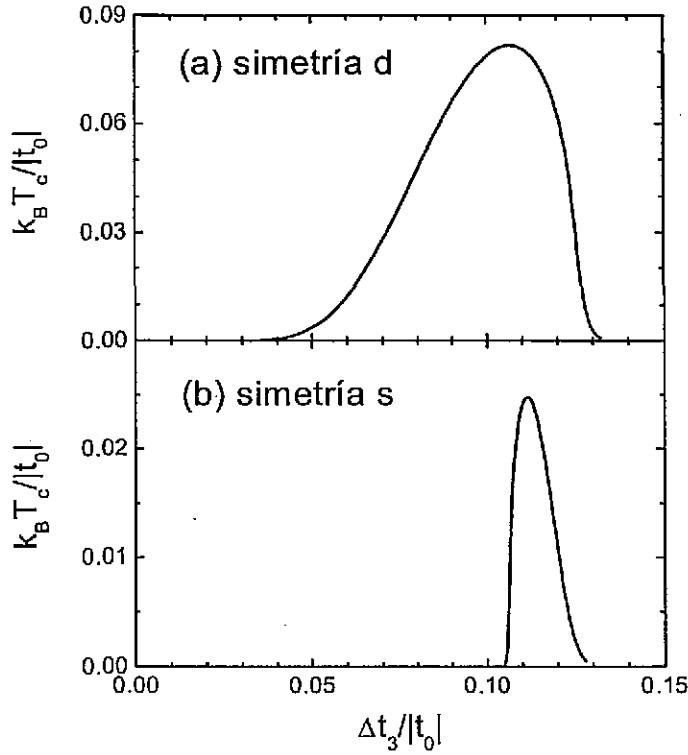


Figura 5.1. Las temperaturas críticas (T_c) para los estados superconductores con (a) simetría d y con (b) simetría s se grafican como funciones del salto correlacionado a segundos vecinos (Δt_3), para una red cuadrada con $U = 6|t_0|$, $V = 0$, $t'_0 = 0.45t_0$, $\Delta t = 0.5|t_0|$, y $n_h = 0.2$.

En las figuras 5.1(a) T_c del canal d y 5.1(b) T_c del canal s , ambas como funciones de Δt_3 , se muestran para un sistema con $U = 6|t_0|$, $V = 0$, $t'_0 = 0.45t_0$, $\Delta t = 0.5|t_0|$, $t_\perp = 0$, y $n_h = 0.2$. Un análisis logarítmico de la figura 5.1(a) sugiere la no existencia de un valor mínimo de Δt_3 para que exista superconductividad en el canal d . Sin embargo, el máximo valor negativo de $\partial T_c / \partial (\Delta t_3)$ ocurre en $\Delta t_3 = t'_0 / (4 - 2n_h) = 0.125|t_0|$, que corresponde al cambio de signo de t' . Por otra parte, para un valor dado de T_c , el valor requerido de Δt_3 es mucho menor para el canal d que para el canal s . Este hecho es relevante ya que en sistemas reales se esperan valores pequeños de Δt_3 . Cabe señalar que el máximo valor de T_c en el canal s depende fuertemente del valor de U , mientras que T_c es independiente de U en el canal d .

En las figuras 5.2(a), 5.2(b) y 5.2(c) se muestran la brecha superconductora con simetría d (Δ_d), la temperatura crítica (T_c) y el cociente $2\Delta_0 / (k_B T_c)$ se grafican en función de la concentración de huecos (n_h) para el mismo sistema que el mostrado en la figura 5.1 con $\Delta t_3 = t'_0/4$. Los valores de Δt y Δt_3 fueron escogidos con el fin de minimizar la energía cinética de los pares. En este caso, para el régimen de densidades muy bajas ($n_h \ll 1$) se pueden obtener resultados analíticos ya que $\varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow 0$. Para

esto, reescribamos la ecuación (5.16) a $T = 0$, como

$$1 = \frac{(4\Delta t_3 - V) a^2}{8\pi^2} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2}{E(\mathbf{k})} dk_x dk_y, \quad (5.21)$$

donde hemos reemplazado la suma por una integral en la primera zona de Brilluoin, es decir, $\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{a^2}{4\pi^2} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_x dk_y$ (Ziman, 1979).

Si suponemos que $|\Delta_d^2 (\cos k_x a - \cos k_y a)^2| \ll |\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu|$, podemos escribir

$$\frac{1}{E(\mathbf{k})} \approx \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu} \left[1 - \frac{\Delta_d^2 (\cos k_x a - \cos k_y a)^2}{2(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2} \right]. \quad (5.22)$$

Como para este caso $\varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ si $n_h \rightarrow 0$, tenemos

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{a^2 (4\Delta t_3 - V)}{8\pi^2 \mu} \iint_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \left\{ [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2 + \frac{\Delta_d^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^4}{\mu^2} \right\} dk_x dk_y \\ &= \frac{(4\Delta t_3 - V)}{8\mu} \left\{ 4 + \frac{9\Delta_d^2}{\mu^2} \right\}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

De manera análoga, sustituyendo (5.22) en (5.14) y tomando el límite $n_h \rightarrow 0$ ($\varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow 0$) obtenemos

$$\begin{aligned} n_h &= \frac{a^2}{4\pi^2} \iint_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{\Delta_d^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2}{2[\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]^2} dk_x dk_y \\ &\approx \frac{a^2 \Delta_d^2}{8\pi^2 \mu^2} \iint_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2 dk_x dk_y = \frac{\Delta_d^2}{2\mu^2}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Combinando (5.23) y (5.24), obtenemos finalmente

$$\Delta_d = \Delta t_3 \sqrt{2n_h} \{2 + 9n_h\} \approx 2\Delta t_3 \sqrt{2n_h} \quad (5.25)$$

Por otra parte, cuando $T=T_c$, $\Delta_d=0$ y por lo tanto $E(\mathbf{k})=|\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu|$. En este caso las ecuaciones (5.16) y (5.14) pueden escribirse como

$$1 = -\frac{(V - 4\Delta t_3) a^2}{8\pi^2} \iint_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2}{|\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu|} \tanh\left(\frac{|\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu|}{2k_B T_c}\right) dk_x dk_y \quad (5.26)$$

y

$$n_h - 1 = -\frac{a^2}{4\pi^2} \iint_{\frac{-\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{|\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu|} \tanh\left(\frac{|\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu|}{2k_B T_c}\right) dk_x dk_y, \quad (5.27)$$

respectivamente. Si $\varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow 0$, de la ecuación (5.26) obtenemos

$$\begin{aligned} 1 &= -\frac{a^2(V - 4\Delta t_3)}{8\pi^2 |\mu|} \tanh\left(\frac{|\mu|}{2k_B T_c}\right) \iint_{\frac{-\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2 dk_x dk_y \\ &= \frac{9(4\Delta t_3 - V)}{8|\mu|} \tanh\left(\frac{|\mu|}{2k_B T_c}\right); \end{aligned} \quad (5.28)$$

mientras que de la ecuación (5.27) se tiene

$$n_h - 1 = -\frac{a^2}{4\pi^2} \frac{\mu}{|\mu|} \tanh\left(\frac{|\mu|}{2k_B T_c}\right) \iint_{\frac{-\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_x dk_y = -\tanh\left(\frac{|\mu|}{2k_B T_c}\right). \quad (5.29)$$

Combinando las ecuaciones (5.26) y (5.27) es fácil obtener

$$k_B T_c = \frac{9(4\Delta t_3 - V)(1 - n_h)}{16 \tanh^{-1}(1 - n_h)}. \quad (5.30)$$

En resumen tenemos que

$$\Delta_d = 2 \left(\Delta t_3 - \frac{V}{4} \right) \sqrt{2n_h}, \quad (5.31)$$

$$k_B T_c = \frac{(4\Delta t_3 - V)(1 - n_h)}{4 \tanh^{-1}(1 - n_h)}, \quad (5.32)$$

$$\frac{2\Delta_0}{k_B T_c} = \frac{2 \ln\left(\frac{2-n_h}{n_h}\right)}{1 - n_h}, \quad (5.33)$$

los cuales se indican con líneas punteadas en la figura 5.2. De hecho para $n_h = 0$, el potencial químico a temperatura cero resulta ser la mitad de la energía de amarre de un singulete de huecos (Pérez y Wang, 2001). Nótese que el cociente $\frac{2\Delta_0}{k_B T_c}$ en el límite diluido es independiente de los parámetros como se encontró en (Marsiglio y Hirsch, 1990a). En general, T_c y Δ_d se incrementan cuando n_h crece ya que la interacción aumenta con la superficie de Fermi. Sin embargo, para densidades altas de huecos

el decremento del término que contiene Δt_3 en la ecuación (5.7) junto con la renormalización de los parámetros de enlace a primeros y segundos vecinos causan que la superconductividad disminuya.

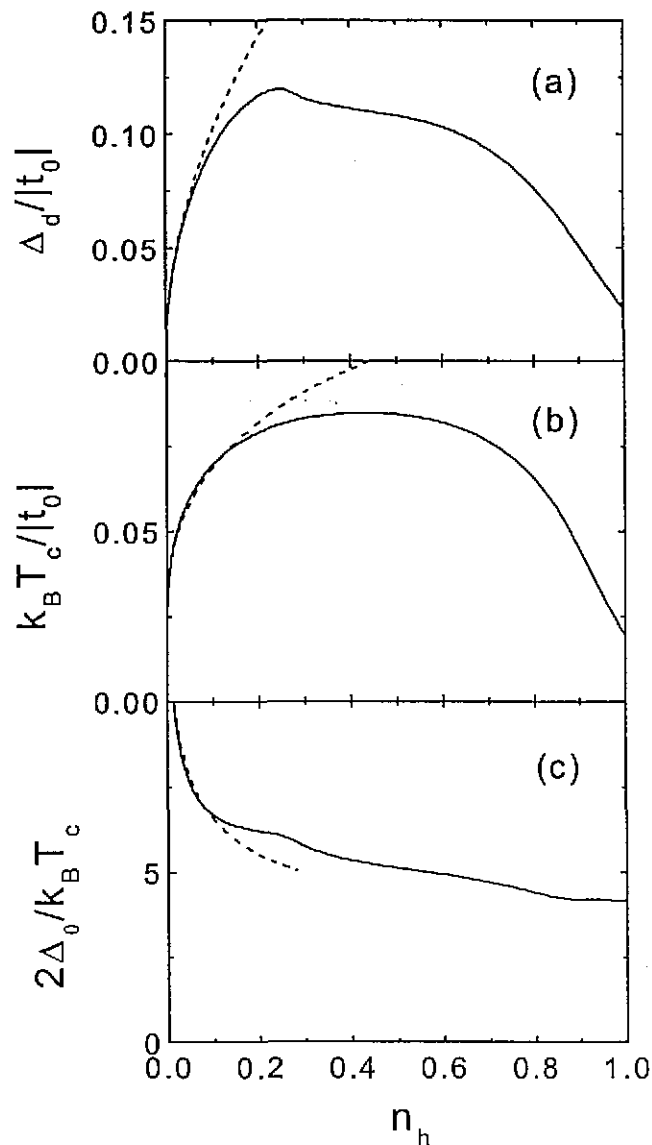


Figura 5.2. (a) La brecha superconductora (Δ_d) a temperatura cero, (b) la temperatura crítica (T_c) y (c) la razón de la brecha [$2\Delta_0/(k_B T_c)$] en el canal d como función de la concentración de huecos (n_h) se muestran para el mismo sistema que en la Fig. 3.1 con $\Delta t_3 = t'_0/4$. Las líneas punteadas corresponden a las respectivas soluciones analíticas en el límite $n_h \rightarrow 0$.

Asimismo, note que en el límite de bajas densidades el cociente $\frac{2\Delta_0}{k_B T_c}$ alcanza valores muy altos en comparación con el valor de 3.57 predicho por la teoría BCS (Bardeen, *et al.*, 1957) y decrece cuando la densidad de huecos se incrementa en concordancia

con los datos experimentales (Yeh, *et al.*, 2001). Más aún, alrededor de $n_h = 0.25$ se observa un pequeño cambio de comportamiento en la figura 5.2(a) y 5.2(c) ya que debajo de esta densidad de huecos el potencial químico es menor que el mínimo de la banda de un solo hueco como se encontró en la referencia (Marsiglio y Hirsch, 1990a). Para una Δt_3 menor que $t'_0/4$ el comportamiento general de T_c como función de n_h es más pronunciado que el mostrado en la figura 5.2. Además, el máximo de T_c disminuye y se corre a bajas densidades conforme Δt_3 decrece como se muestra en la figura 5.3.

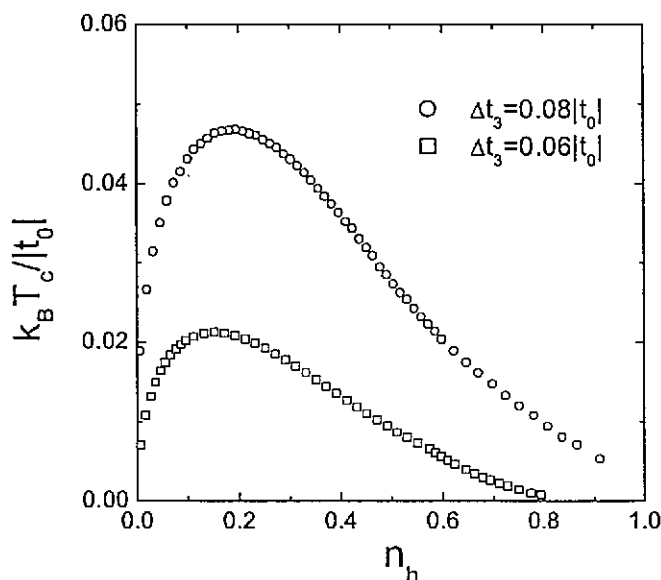


Figura 5.3. Temperatura crítica (T_c) en función de la concentración de huecos (n_h) para el mismo sistema que en la figura 5.2 pero con $\Delta t_3 = 0.08|t_0|$ (círculos abiertos) y $\Delta t_3 = 0.06|t_0|$ (cuadrados abiertos).

Los efectos de la dimensionalidad sobre el estado superconductor se muestran en las figuras 5.4(a), 5.4(b), y 5.4(c), que corresponden a las mismas cantidades que en las figuras 5.2(a), 5.2(b), and 5.2(c), respectivamente, excepto que están graficadas como función del valor del parámetros de enlace intra-planar ($t_{0\perp}$). Dos casos han sido considerados: el isotrópico $t_{\perp} = t_{0\perp}$ (círculos abiertos) y el anisotrópico $t_{\perp} = t_{\perp}(\mathbf{k})$ (cuadrados abiertos). Para algunos superconductores de alta T_c , los cálculos de estructura de bandas sugieren un parámetro de enlace intra-planar de la forma $t_{\perp}(\mathbf{k}) = \frac{t_{0\perp}}{4} [\cos(k_x a_{\perp}) - \cos(k_y a_{\perp})]^2$ de tal forma que el acoplamiento entre planos está dominado por los estados cercanos a los puntos $(\pm\pi, 0)$ y $(0, \pm\pi)$ de la primera zona de Brillouin en donde la brecha superconductor es máxima (Andersen, *et al.*, 1995). De la figura 5.4 se observa que en general el estado superconductor se debilita al incrementar $t_{0\perp}$, siendo más pronunciados los efectos en el caso isotrópico.

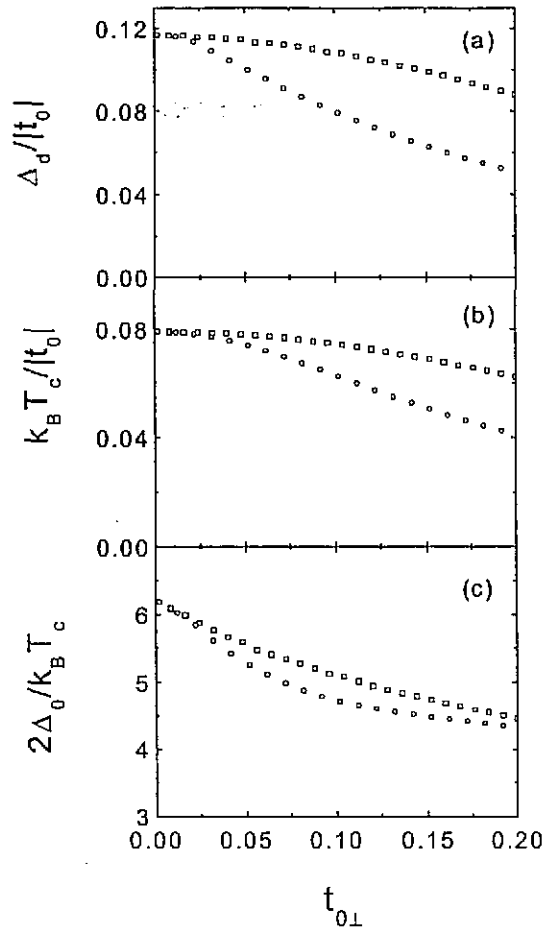


Figura 5.4. (a) La brecha superconductor con simetría d (Δ_d), (b) la temperatura crítica (T_c) y (c) el cociente $[2\Delta_0/(k_B T_c)]$ como funciones del parámetro de salto intraplanar ($t_{0\perp}$) tanto para el caso isotrópico (círculos abiertos) como anisotrópico (cuadrados abiertos) se muestran para el mismo sistema que en la Fig. 5.2 con $n_h = 0.2$.

La figura 5.5(a) muestra la dependencia con la temperatura del cociente $2\Delta_0/(k_B T_c)$ para el mismo sistema que en la figura 5.2(c) (línea sólida), en comparación con el cociente que corresponde a un estado superconductor con simetría s obtenido a partir de un modelo de Hubbard atractivo con $t'_0 = 0.45t_0$, $U = -2|t_0|$, $V = \Delta t = \Delta t_3 = t_\perp = 0$ (línea punteada), ambos para una densidad de huecos $n_h = 0.5$. Cabe mencionar que el cociente $2\Delta_0/(k_B T_c)$ para un modelo de Hubbard con U negativa es esencialmente independiente de U y es muy cercano a la predicción de BCS aún cuando en el primer caso la interacción es uniforme en todo el espacio \mathbf{k} . En la figura 5.5(b), se muestran de manera comparativa los cocientes de brecha normalizados para los mismos sistemas que en la gráfica principal. Observe que la dependencia con la temperatura de un estado superconductor con simetría d es diferente del estado superconductor con simetría s . Conclusiones similares pueden obtenerse de la referencia (Dagotto, *et al.*, 1995).

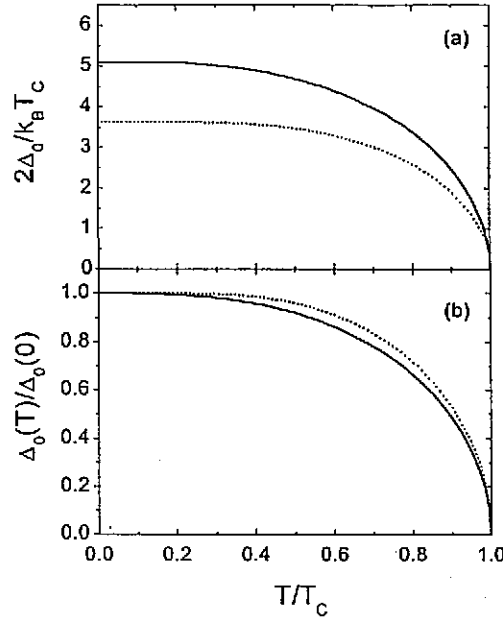


Figura 5.5. (a) Dependencia con la temperatura del cociente de la brecha $[2\Delta_0/(k_B T_c)]$ para el mismo sistema que en la Fig. 3.2(c) (línea sólida), en comparación con el cociente de un estado superconductor con simetría s obtenido de un modelo de Hubbard atractivo con $t'_0 = 0.45t_0$, $U = -2|t_0|$, $V = \Delta t = \Delta t_3 = t_\perp = 0$ (líneas punteadas), ambos para una densidad de huecos de $n_h = 0.5$. En (b) se muestran los correspondientes cocientes de la brecha renormalizados.

Los modelos de Hubbard extendidos que consideran una V negativa pueden presentar un estado superconductor con simetría d para densidades de huecos cercanas a $n_h = 1$ mientras que para bajas densidades ($n_h \ll 1$) el estado base superconductor tiene simetría s extendida. Otro inconveniente de este tipo de modelos es que en la vecindad de la región superconductor el estado base presenta un régimen de separación de fase en la que los huecos ocupan doblemente los sitios de una región macroscópica del sistema para minimizar la energía, reduciendo así la zona de estabilidad de la fase superconductor. En la figura 5.5 se presenta el diagrama de fase para un sistema con $U = \Delta t = 0$, $t'_0 = 4\Delta t_3$, y $n_h = 1$ con el fin de analizar la competencia entre el estado superconductor y la separación de fases en la que los huecos ocupan doblemente los sitios de una región macroscópica del sistema para minimizar la energía cuando se considera una interacción V negativa. En particular este sistema ha sido escogido para análisis ya que el punto de comienzo, es decir, $\Delta t_3 = 0$, reproduce parte de la figura 8 de la referencia (Dagotto, *et al.*, 1994b). Partiendo de la ecuación (2.17), la energía por sitio del estado base superconductor puede escribirse como

$$\frac{E_{g.s.}}{N_s} = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] - \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E_{\mathbf{k}}} + \mu n_h - \left(\frac{U}{4} + 2V \right) n_h^2. \quad (5.34)$$

En el caso de una brecha superconductor con simetría d , esta ecuación puede reescri-

birse como

$$\frac{E_{g.s.}}{N_s} = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] - \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} - \frac{\Delta_d^2}{V - 4\Delta t_3} + \mu n_h - \left(\frac{U}{4} + 2V \right) n_h^2. \quad (5.35)$$

Por otra parte, en la región que corresponde a $V < 0$ puede ser energéticamente favorable tener un estado de separación de fases con una región sin huecos y otra región llena de sitios doblemente ocupados si U no es demasiado grande. Si suponemos una separación de fases perfecta en la que los huecos están completamente excluidos de la parte vacía de la red, la energía de este estado puede escribirse como (Dagotto, *et al.*, 1994)

$$\frac{E_{P.S.}}{N_s} = \left(\frac{U}{2} + 4V \right) n_h. \quad (5.36)$$

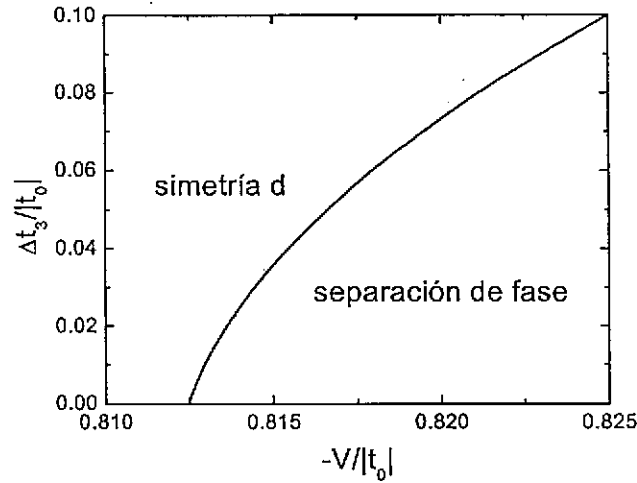


Figura 5.6. Diagrama de fase del estado base para un sistema con $U = \Delta t = 0$, $t'_0 = 4\Delta t_3$, y $n_h = 1$.

Podemos observar que la presencia de Δt_3 amplifica la región donde el estado superconductor en el canal d es más estable, lo cual es importante ya que la separación de fases dominaría sobre el estado superconductor cuando V se incrementa.

Con el fin de comparar con datos experimentales, hemos calculado las propiedades físicas del estado superconductor partiendo del hamiltoniano de Hubbard generalizado para huecos con parámetros obtenidos por cálculos de primeros principios (Pérez y Wang, 2002b). La estructura de bandas observada por espectroscopía de fotoemisión con resolución angular (Shen, *et al.*, 1993) y reproducida por la teoría de la funcional de densidad (Andersen, *et al.* 1995) puede describirse razonablemente bien por un modelo bidimensional de amarre fuerte con un parámetro de salto a segundos vecinos cuyo valor es $t'_0 = 0.45t_0$ para el sistema $YBaCuO$ (Yu, *et al.*, 1988), y $t'_0 = 0.30t_0$ para el sistema $BiSrCaCuO$ (Andersen, 1995), en donde $-t_0$ es el parámetro de salto a lo largo de los enlaces $Cu-O$. Considerando entonces parámetros de salto a primeros

y segundos vecinos con signos opuestos entre sí, las temperaturas críticas del estado superconductor con simetría d en función de la concentración de huecos, se muestran en la figura 5.7 para un sistema con $t_{\perp} = V = 0$, $\Delta t = 0.5|t_0|$, y distintos valores de salto a segundos vecinos: $t'_0 = 0.3|t_0|$ (líneas sólidas), y $t'_0 = 0.45|t_0|$ (líneas punteadas) así como distintos valores de la interacción de carga-enlace $\Delta t_3 = 0.1|t_0|$ (líneas gruesas), $\Delta t_3 = 0.08|t_0|$ (líneas medianas), y $\Delta t_3 = 0.06|t_0|$ (líneas delgadas). Nótese que la dependencia de T_c como función de n_h concuerda con la forma parabólica observada en los cupratos (Presland, *et al.*, 1991) y además, el máximo de T_c se corre a bajas densidades cuando se incrementa el parámetro de salto a segundos vecinos. Asimismo, para una densidad fija, el valor de T_c se incrementa con Δt_3 como es de esperarse.

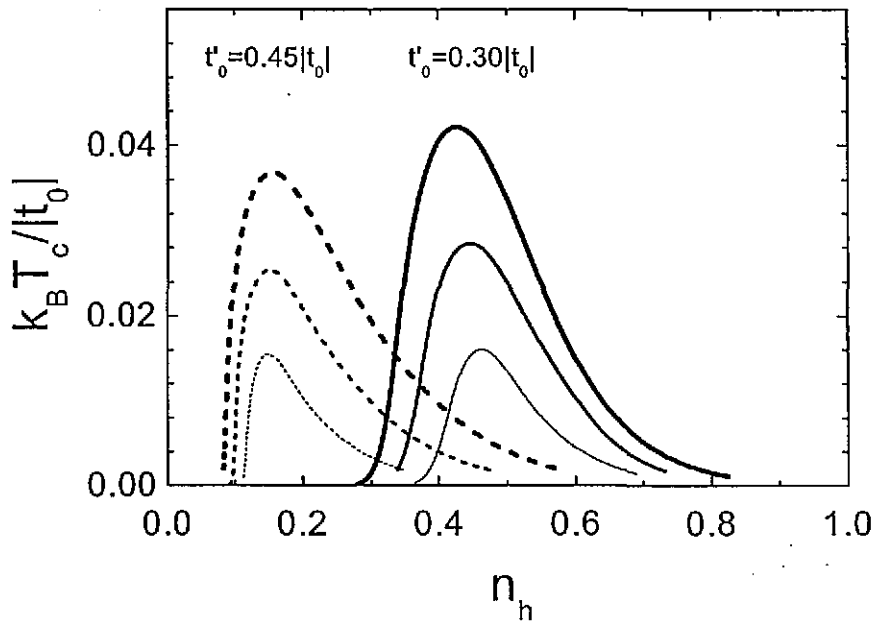


Figura 5.7 Temperatura crítica del estado superconductor con simetría d (T_c) en función de la concentración de huecos (n_h) para $t'_0 = 0.3|t_0|$ (líneas continuas) y $t'_0 = 0.45|t_0|$ (líneas punteadas), donde $\Delta t_3 = 0.1|t_0|$ (líneas gruesas), $0.08|t_0|$ (líneas medianas) y $0.06|t_0|$ (líneas delgadas).

Por otra parte, como hemos visto, los experimentos de efecto Josephson y cuantización de flujo magnético sugieren una brecha superconductor $\Delta_{\mathbf{k}}$ con simetría $d_{x^2-y^2}$ en la mayoría de los cupratos. Asimismo, la energía mínima de excitación ($E(\mathbf{k})_{\min}$) ha sido medida por experimentos de espectroscopía de fotoemisión y tunelaje con resolución angular. Por un lado, los de fotoemisión muestran que la brecha de excitación del $BiSrCaCuO$ tiene una simetría $d_{x^2-y^2}$ (Ding, *et al.*, 1996; Mesot, *et al.*, 1999) y por otro lado, los de tunelaje muestran que ésta semeja la simetría d_{xy} (ver tabla 5.1) [Kane y Ng, 1996; Kane, *et al.*, 1998]. Si escogemos como valores típicos $t'_0 = 0.40|t_0|$, $\Delta t_3 = 0.1|t_0|$ y $|t_0| = 2.2eV$, la dependencia angular de la brecha de excitación [$\Delta_0(\theta)$] se muestra en la figura 5.6, donde $\theta = \tan^{-1}(k_y/k_x)$ y Δ_0 se define como

el mínimo valor de E_k dado por la ecuación (5.15). En la figura 5.6(a) se comparan los resultados teóricos obtenidos para $n_h = 0.224$ (línea continua) con aquellos (cuadrados sólidos) obtenidos a partir de espectroscopía de fotoemisión con resolución angular (Ding, *et al.*, 1996). Observe que $\Delta_0(\theta)$ presenta nodos en $\theta = \pi/4$ y $\theta = 3\pi/4$. Minimizando la ecuación (5.15), se puede obtener que la condición para la existencia de nodos angulares es $\mu \geq -t^2/t'$, donde $t = -t_0 + n_h \Delta t$. En otras palabras, si el potencial químico satisface $\mu < -t^2/t'$, el valor de $\Delta_0(0)$ podría ser mayor o menor que $\Delta_0(\pi/4)$. Este último caso se muestra en la figura 5.6(b) para el mismo sistema que en la figura 5.6(a) excepto $n_h = 0.227$, donde los resultados teóricos (línea continua) se comparan con aquellos obtenidos a partir de espectroscopía de tunelaje (cuadrados sólidos) [Kane y Ng, 1994]. Nótese que los máximos de $\Delta_0(\theta)$ en la figura 5.6(b) están girados por $\pi/4$ con respecto a los de la figura 5.6(a).

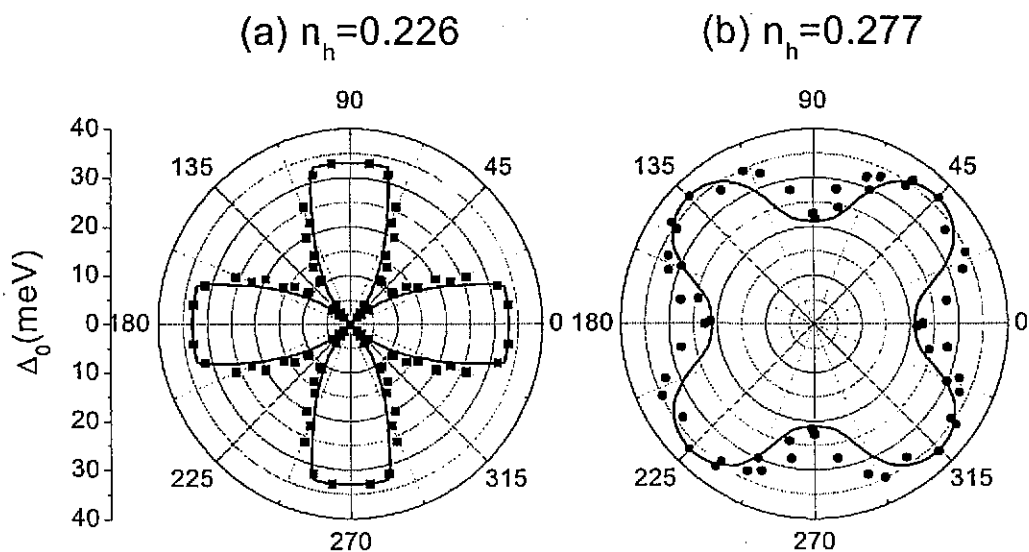


Figura 5.8. Brecha de excitación (Δ_0) en función del ángulo polar para (a) $t'_0 = 0.4|t_0|$, $\Delta t_3 = 0.1|t_0|$, y $n_h = 0.224$ y (b) $t'_0 = 0.4|t_0|$, $\Delta t_3 = 0.1|t_0|$, y $n_h = 0.277$ (líneas continuas) en comparación con los resultados experimentales de espectroscopía de fotoemisión (cuadrados sólidos) y tunelaje (círculos sólidos).

En general, el modelo predice una rotación de la brecha de energía como función del ángulo polar cuando la densidad de huecos varía, lo cual podría ser una posible explicación de la diferencia en la orientación de la brecha de excitación observada en los experimentos mencionados.

Conclusiones

En esta tesis hemos abordado dos problemas que son el apareamiento electrónico y la superconductividad dentro del modelo de Hubbard. El primero se analiza de manera exacta extendiendo el método del espacio de estados para incluir las interacciones de carga-enlace, las cuales aparecen como "impurezas de enlace" en el problema equivalente de amarre fuerte en el espacio de mayor dimensión. Este método proporciona una asociación interesante entre los estados apareados y los de impureza, así como una manera alternativa y en ocasiones más simple de calcular las propiedades físicas de los estados apareados que dependen directamente de la función de onda del par en el espacio real, tales como la longitud de coherencia. Las principales conclusiones de esta primera parte del estudio son las siguientes:

- (1) La interacción de carga-enlace a primeros vecinos (Δt) permite la formación de singuletes con simetría s anisotrópica, sin necesidad de interacciones densidad-densidad atractivas.
- (2) La inclusión de los términos de carga-enlace rompe la simetría electrón-hueco del hamiltoniano de Hubbard y favorece el apareamiento de huecos.
- (3) Se encuentra una región alrededor de $\Delta t = 0.5|t_0|$, donde existe apareamiento de huecos aún cuando las interacciones repulsivas U y V son relativamente intensas.
- (4) Se observa una reducción significativa de la masa efectiva de los pares de huecos en comparación con la de los huecos no apareados alrededor de $\Delta t = 0.5|t_0|$, lo cual puede ayudar a la condensación de Bose-Einstein de dichos singuletes.
- (5) Se obtuvo una solución analítica para los diagramas de fase del estado base de singuletes en las redes lineal, cuadrada, triangular y cúbica, los cuales muestran que la baja dimensionalidad favorece el apareamiento.
- (6) Una interacción de carga-enlace a segundos vecinos (Δt_3) de magnitud infinitesimal induce la formación de singuletes de huecos con simetría $d_{x^2-y^2}$ para $U > 0$.
- (7) La región de apareamiento con simetría $d_{x^2-y^2}$ se incrementa cuando el valor de la repulsión coulombiana intrasitio U crece.
- (8) La presencia de un fondo antiferromagnético incrementa la energía de amarre de los singuletes de huecos con simetría $d_{x^2-y^2}$.
- (9) También se encuentra una región alrededor de $\Delta t_3 = 0.225|t'_0|$, donde la masa efectiva de los pares sufre una reducción significativa en comparación con la masa de los huecos no apareados.
- (10) En dicha región, la energía de amarre y la longitud de coherencia de los pares con simetría d en un fondo antiferromagnético son mayores que las de los pares sin fondo antiferromagnético.

En la segunda parte de la tesis extendemos el estudio anterior a una densidad finita de huecos interaccionando a través del hamiltoniano de Hubbard generalizado y analizamos el estado superconductor por medio del formalismo BCS. Las principales conclusiones de esta segunda parte de la tesis son:

- (1) La interacción de carga-enlace a segundos vecinos (Δt_3) estabiliza el estado superconductor con simetría $d_{x^2-y^2}$ para un intervalo amplio de concentraciones de huecos, incluyendo bajas densidades, a diferencia de lo que ocurre en el modelo de Hubbard con interacción atractiva V .
- (2) La interacción Δt_3 fortalece el estado superconductor con simetría d , en la competencia con el estado de separación de fases.
- (3) El cociente entre la brecha de excitación y la temperatura crítica se incrementa cuando la densidad de huecos

- disminuye, en concordancia con las observaciones experimentales en los cupratos superconductores.
- (4) El modelo predice una rotación de la brecha de excitación con simetría d como función del ángulo polar cuando varía la densidad de huecos.
 - (5) El acoplamiento interplanar debilita el estado superconductor.

Los resultados anteriores muestran que términos usualmente despreciados en el modelo de Hubbard podrían ser esenciales para determinar el estado base del sistema. En particular, hemos visto que la interacción de carga-enlace a segundos vecinos es fundamental para la superconductividad con simetría d , a pesar de su magnitud relativamente pequeña en comparación con otras interacciones dentro del modelo. Más aún, partiendo de los parámetros obtenidos de cálculos a primeros principios, los resultados de nuestro modelo concuerdan bien con los datos experimentales obtenidos de experimentos de tunelaje y espectroscopía de fotoemisión.

Por último, cabe mencionar que el presente trabajo puede extenderse hacia el estudio de superconductividad con tripletes de huecos. Se ha demostrado anteriormente que en redes no bipartitas existe una asimetría electrón-hueco en la que el apareamiento de huecos es más fuerte que el de los electrones debido a la frustración de estados antienlazantes (Pérez, *et al.*, 1996). Además, el estado base de dos huecos es triplete cuando la interacción V es atractiva. Sin embargo, al pasar a densidades finitas esta interacción podría favorecer el estado de separación de fase. La inclusión de la interacción Δt_3 parece permitir la formación de tripletes sin necesidad de exigir $V < 0$, lo que eventualmente podría dar lugar a un estado base superconductor formado por tripletes en redes no bipartitas.

Apéndice A

Hamiltoniano de Hubbard en el Espacio Recíproco

En esta apéndice consideraremos, a manera de ejemplo, la transformación al espacio recíproco del hamiltoniano de Hubbard generalizado

$$H = H_t + H_U + H_V + H_{\Delta t}, \quad (\text{A.1})$$

donde

$$H_t = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma}, \quad (\text{A.2})$$

$$H_U = U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (\text{A.3})$$

$$H_V = \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j, \quad (\text{A.4})$$

$$H_{\Delta t} = \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} (n_{i,-\sigma} + n_{j,-\sigma}). \quad (\text{A.5})$$

Para pasar al espacio recíproco utilizamos las siguientes relaciones (Mahan, 1990)

$$c_{i,\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma}^+, \quad c_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (\text{A.6})$$

y

$$\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{N_s} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i}. \quad (\text{A.7})$$

Sustituyendo estas relaciones en (A.2), obtenemos

$$H_t = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i - \mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j)} c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}',\sigma}. \quad (\text{A.8})$$

Pero $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_\gamma$, donde \mathbf{R}_γ denota los Z primeros vecinos de cada sitio i . De esta manera podemos escribir

$$\begin{aligned} H_t &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\frac{1}{N} \sum_{i,\sigma} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} \right) \left(\sum_{\gamma} t e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_\gamma} \right) c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}',\sigma} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \varepsilon(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}',\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma}, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

donde

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \equiv \sum_{\gamma} t e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_{\gamma}} \quad (\text{A.10})$$

Para el segundo término (A.3) del hamiltoniano (A.1) tenemos

$$\begin{aligned} H_U &= U \sum_i c_{i,\uparrow}^+ c_{i,\uparrow} c_{i,\downarrow}^+ c_{i,\downarrow} = U \sum_i c_{i,\uparrow}^+ c_{i,\downarrow}^+ c_{i,\downarrow} c_{i,\uparrow} \\ &= \frac{U}{N^2} \sum_{\substack{i,\mathbf{k},\mathbf{k}' \\ \mathbf{q},\mathbf{q}'}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{\mathbf{q},\downarrow}^+ c_{\mathbf{q}',\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow} = \frac{U}{N} \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}' \\ \mathbf{q},\mathbf{q}'}} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}-\mathbf{q}') c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{\mathbf{q},\downarrow}^+ c_{\mathbf{q}',\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow} \\ &= \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{\mathbf{q},\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow} = \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^+ c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\uparrow}, \quad (\text{A.11}) \end{aligned}$$

En la última igualdad hemos hecho los cambios de variable $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p} + \mathbf{Q}$, $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{p} + \mathbf{Q}$, $\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{p}' + \mathbf{Q}$. Finalmente, renombramos las variables \mathbf{p} , \mathbf{p}' , \mathbf{Q} por \mathbf{k} , \mathbf{k}' y \mathbf{q} , respectivamente.

Para el término dado por la ecuación (A.4) podemos escribir

$$\begin{aligned} H_V &= \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma, \sigma'} n_{i,\sigma} n_{j,\sigma'} = \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma, \sigma'} c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma} c_{j,\sigma'}^+ c_{j,\sigma'} \\ &= \frac{V}{2N} \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\mathbf{q}' \\ \sigma,\sigma'}} \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{R}_i} \sum_{\gamma} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{R}_{\gamma}} c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}',\sigma} c_{\mathbf{q},\sigma'}^+ c_{\mathbf{q}',\sigma'} \\ &= \frac{V}{2tN} \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}' \\ \mathbf{q},\mathbf{q}',\sigma}} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}-\mathbf{q}') \varepsilon(\mathbf{q}-\mathbf{q}') [c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}',\sigma} c_{\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{q}',\sigma} + c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}',\sigma} c_{\mathbf{q},-\sigma}^+ c_{\mathbf{q}',-\sigma}] \\ &= \frac{V}{2tN} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{q}',\sigma} \varepsilon(\mathbf{q}-\mathbf{q}') c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}',\sigma} c_{\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{q}',\sigma} \\ &\quad + \frac{V}{2tN} \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}' \\ \mathbf{q},\mathbf{q}'}} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}-\mathbf{q}') \varepsilon(\mathbf{q}-\mathbf{q}') [c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{\mathbf{q},\downarrow}^+ c_{\mathbf{q}',\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow} + c_{\mathbf{q},\uparrow}^+ c_{\mathbf{k},\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}',\downarrow} c_{\mathbf{q}',\uparrow}] \\ &= \frac{V}{2tN} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{q}',\sigma} \varepsilon(\mathbf{q}-\mathbf{q}') c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}',\sigma} c_{\mathbf{q},\sigma}^+ c_{\mathbf{q}',\sigma} \\ &\quad + \frac{V}{tN} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\mathbf{q}'} \varepsilon(\mathbf{q}-\mathbf{q}') c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{\mathbf{q},\downarrow}^+ c_{\mathbf{q}',\downarrow} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}',\uparrow} \quad (\text{A.12}) \end{aligned}$$

En la última igualdad usamos el hecho de que \mathbf{q} , \mathbf{k} y \mathbf{k}' son variables mudas. Renombrando las variables de manera similar a como se hizo con el término H_U , podemos

escribir esta última ecuación como

$$\begin{aligned}
 H_V &= \frac{V}{2tN} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}', \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}-\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^+ c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^+ c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} \\
 &+ \frac{V}{tN} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \mathbf{q}'} \varepsilon(\mathbf{k}-\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^+ c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \uparrow} \quad (\text{A.13})
 \end{aligned}$$

Por último, transformemos el término (A.5)

$$\begin{aligned}
 H_{\Delta t} &= \Delta t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} (c_{i, \sigma}^+ c_{j, \sigma} c_{i, -\sigma}^+ c_{j, -\sigma} + c_{i, \sigma}^+ c_{j, \sigma} c_{j, -\sigma}^+ c_{i, -\sigma}) \\
 &= \frac{\Delta t}{N^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \mathbf{q}, \mathbf{q}'}} \sum_{\substack{i, j \\ \sigma}} \left[e^{i([\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'] \cdot \mathbf{R}_i - \mathbf{k}' \cdot [\mathbf{R}_i + \mathbf{R}_j])} + e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i - [\mathbf{k}' - \mathbf{q} + \mathbf{q}'] \cdot [\mathbf{R}_i + \mathbf{R}_j])} \right] c_{\mathbf{k}, \sigma}^+ c_{\mathbf{k}', \sigma} c_{\mathbf{q}, -\sigma}^+ c_{\mathbf{q}', -\sigma} \\
 &= \frac{\Delta t}{N} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \mathbf{q}, \mathbf{q}', \sigma}} \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{R}_i} \left[\sum_{\gamma} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_\gamma} + \sum_{\gamma} e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot \mathbf{R}_\gamma} \right] c_{\mathbf{k}, \sigma}^+ c_{\mathbf{k}', \sigma} c_{\mathbf{q}, -\sigma}^+ c_{\mathbf{q}', -\sigma} \\
 &= \frac{\Delta t}{tN} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \mathbf{q}, \mathbf{q}', \sigma}} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}-\mathbf{q}') [\varepsilon(\mathbf{k}') + \varepsilon(\mathbf{k}' - \mathbf{q} + \mathbf{q}')] c_{\mathbf{k}, \sigma}^+ c_{\mathbf{k}', \sigma} c_{\mathbf{q}, -\sigma}^+ c_{\mathbf{q}', -\sigma} \\
 &= \frac{\Delta t}{tN} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \mathbf{q}, \sigma}} [\varepsilon(\mathbf{k}') + \varepsilon(\mathbf{k})] c_{\mathbf{k}, \sigma}^+ c_{\mathbf{q}, -\sigma}^+ c_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, -\sigma} c_{\mathbf{k}', \sigma} \\
 &= \frac{\Delta t}{tN} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} [\varepsilon(\mathbf{k}') + \varepsilon(\mathbf{k})] [c_{\mathbf{k}, \uparrow}^+ c_{\mathbf{q}, \downarrow}^+ c_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow} + c_{\mathbf{k}, \downarrow}^+ c_{\mathbf{q}, \uparrow}^+ c_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \uparrow} c_{\mathbf{k}', \downarrow}] \\
 &= \frac{\Delta t}{tN} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} [\varepsilon(\mathbf{k}') + \varepsilon(\mathbf{k})] c_{\mathbf{k}, \uparrow}^+ c_{\mathbf{q}, \downarrow}^+ c_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow} \\
 &+ \frac{\Delta t}{tN} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} [\varepsilon(\mathbf{k}') + \varepsilon(\mathbf{k})] c_{\mathbf{q}, \uparrow}^+ c_{\mathbf{k}, \downarrow}^+ c_{\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \uparrow} \quad (\text{A.14})
 \end{aligned}$$

Si hacemos los intercambios de variables siguientes: $\mathbf{k} \longleftrightarrow \mathbf{p}$, $\mathbf{k}' \longleftrightarrow \mathbf{k} + \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ en el segundo término de la suma obtenemos

$$H_{\Delta t} = \frac{\Delta t}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} [\varepsilon(\mathbf{k}') + \varepsilon(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{k}') + \varepsilon(\mathbf{q})] c_{\mathbf{k}, \uparrow}^+ c_{\mathbf{q}, \downarrow}^+ c_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow} \quad (\text{A.15})$$

Finalmente, realizando los mismos cambios de variable que para los términos H_U y

H_V , la última expresión puede reescribirse como

$$H_{\Delta t} = \frac{\Delta t}{N} \sum_{\substack{k, k' \\ q}} [\varepsilon(\mathbf{k}+\mathbf{q}) + \varepsilon(-\mathbf{k}+\mathbf{q}) + \varepsilon(-\mathbf{k}'+\mathbf{q}) + \varepsilon(\mathbf{k}'+\mathbf{q})] c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{\mathbf{q},\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow}. \quad (\text{A.16})$$

Apéndice B

Solución Analítica en una Dimensión.

En este apéndice calculamos de manera analítica, la energía de amarre y la longitud de coherencia de singletes en una cadena lineal a partir del modelo de Hubbard generalizado.

De la ecuación (3.33) con $Z = 2$, tenemos

$$G_0(\rho) \left[\frac{V|E_0|}{2t} (1 + \rho)^2 + \left(\frac{UV}{4t} - 4\Delta t - \frac{2\Delta t^2}{t} \right) (1 + \rho) + \frac{Ut}{|E_0|} \right] + 2t \left(1 + \frac{\Delta t}{t} \right)^2 - \frac{V|E_0|}{2t} (1 + \rho) - \frac{UV}{4t} = 0. \quad (\text{B.1})$$

donde la función de Green $[G_0(\rho)]$ está dada por

$$G_0(\rho) = \frac{1}{N_s} \sum_k \frac{1}{1 + \rho + \frac{2t}{|E_0|} \cos(ka)}. \quad (\text{B.2})$$

En el límite $N \rightarrow \infty$, la suma anterior puede reemplazarse por una integración en la primera zona de Brillouin (1ZB), es decir, $\frac{1}{N_s} \sum_k \rightarrow \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk$ (Ziman, 1979) por lo que tenemos

$$G_0(\rho) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{dk}{1 + \rho + \frac{t}{|t|} \cos(ka)} = \frac{1}{2\pi(1 + \rho)} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dx}{1 + C \cos x}, \quad (\text{B.3})$$

donde hemos definido $C = \frac{t}{|t|(1 + \rho)}$. En tablas (Gradshteyn y Ryzhik, 1980) encontramos

$$\int \frac{dx}{1 + C \cos x} = \frac{2}{C\sqrt{1 - C^2}} \tan^{-1} \left[\frac{(1 - C) \tan(x/2)}{\sqrt{1 - C^2}} \right] \text{ si } C^2 < 1. \quad (\text{B.4})$$

Para estados apareados ($\rho > 0$) por lo que siempre se cumple $C^2 < 1$ y así

$$\begin{aligned} G_0(\rho) &= \frac{1}{2\pi a(1+\rho)} \frac{2}{\sqrt{1-C^2}} \tan^{-1} \left[\frac{(1-C) \tan(x/2)}{\sqrt{1-C^2}} \right]_{-\pi}^{\pi} = \\ &= \frac{1}{2\pi(1+\rho)} \frac{2}{\sqrt{1-C^2}} \pi = \frac{1}{\sqrt{(1+\rho)^2 - 1}} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Sustituyendo (B.5) en la ecuación (B.1) y haciendo $U = V = 0$ obtenemos

$$\frac{(1+\rho)}{\sqrt{(1+\rho)^2 - 1}} = \frac{(t+\Delta t)^2}{(2t\Delta t + \Delta t^2)} \equiv \frac{(t_0 - \Delta t)^2}{\Delta t(2t_0 - 3\Delta t)} \quad (\text{B.6})$$

Ahora bien, existirá un estado apareado si la energía de amarre normalizada (ρ) es positiva. Esto implica que el lado derecho de la ecuación anterior debe ser positivo, es decir, $2t_0 - 3\Delta t > 0$. En consecuencia solo existirán estados apareados en el intervalo $0 < \Delta t < \frac{2t_0}{3}$. Si Δt satisface esta desigualdad, podemos elevar al cuadrado la ecuación (B.6) y simplificando obtenemos

$$(1+\rho)^2 [\Delta t^2 (2t_0 - 3\Delta t)^2 - 4(t_0 - \Delta t)^4] + (t_0 - \Delta t)^4 = 0, \quad (\text{B.7})$$

de donde

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{(t_0 - \Delta t)^2}{\sqrt{4(t_0 - \Delta t)^4 - \Delta t^2(2t_0 - 3\Delta t)^2}} - 1 = \\ &= \frac{(t_0 - \Delta t)^2}{\sqrt{2}|t_0 - 2\Delta t| \sqrt{\left(\frac{t_0}{\sqrt{2}} - \Delta t\right) \left(\frac{t_0}{\sqrt{2}} + \Delta t\right)}} - 1. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

En términos de la energía de amarre $\Delta_2 = 4|t|\rho = 4|t_0 - 2\Delta t|\rho$ obtenemos finalmente

$$\Delta_2 = \frac{2\sqrt{2}(t_0 - \Delta t)^2}{\sqrt{\left(\frac{t_0}{\sqrt{2}} - \Delta t\right) \left(\frac{t_0}{\sqrt{2}} + \Delta t\right)}} - 4|t_0 - 2\Delta t|, \quad (\text{B.9})$$

recordando que la solución es válida en el intervalo $0 < \Delta t < \frac{2t_0}{3}$ únicamente. La energía del estado base del par ($E_2 = -4|t| - \Delta_2$) es entonces

$$E_2 = \frac{-2\sqrt{2}(t_0 - \Delta t)^2}{\sqrt{\left(\frac{t_0}{\sqrt{2}} - \Delta t\right) \left(\frac{t_0}{\sqrt{2}} + \Delta t\right)}}. \quad (\text{B.10})$$

Para esta energía, el sistema de ecuaciones homogéneo (3.31) tiene solución no trivial para f_0 y f_1 . Despejando f_1 de cualquiera de las dos ecuaciones de este sistema, por ejemplo de la primera, y usando las relaciones (3.34) obtenemos para $U = V = 0$

$$f_1 = \frac{-f_0 |t| [t + \Delta t - \Delta t (1 + \rho) G_0(\rho)]}{t \Delta t G_0(\rho)}. \quad (\text{B.11})$$

Asimismo, en este caso de la cadena lineal ($Z = 2$) con $U = V = 0$, de la ecuación (3.29) obtenemos

$$f(k) = \frac{2\frac{\Delta t}{t}\epsilon(k)}{E_2 - 2\epsilon(k)}f_0 + \frac{4\Delta t}{E_2 - 2\epsilon(k)}f_1 \quad (\text{B.12})$$

donde $\epsilon(k) = 2t \cos(ka)$ siendo a el parámetro de red. Como vimos en el capítulo 3, la función de onda espacial en el espacio real (f_n) viene dada por la transformada de Fourier de $f(k)$

$$f_n = \frac{1}{N_s} \sum_k f(k) e^{-ikna}. \quad (\text{B.13})$$

En el límite de $N_s \rightarrow \infty$, aproximamos la suma sobre k por una integral sobre la primera zona de Brillouin y obtenemos

$$\begin{aligned} f_n &= \frac{a}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} f(k) e^{-ikna} dk = \\ &= \frac{a\Delta t}{\pi t} f_0 \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{e^{-ikna} \epsilon(k)}{E_2 - 2\epsilon(k)} dk + \frac{2a\Delta t}{\pi} f_1 \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{e^{-ikna}}{E_2 - 2\epsilon(k)} dk \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

En términos de la energía de amarre normalizada, la expresión anterior puede reescribirse como

$$\begin{aligned} f_n &= -\frac{a\Delta t}{2\pi |t|} f_0 \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{e^{-ikna} \cos(ka)}{1 + \rho + \frac{t}{|t|} \cos(ka)} dk - \frac{a\Delta t}{2|t|\pi} f_1 \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{e^{-ikna}}{1 + \rho + \frac{t}{|t|} \cos(ka)} dk = \\ &= -\frac{a\Delta t}{\pi |t|} f_0 \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{\cos(kna) \cos(ka)}{1 + \rho + \frac{t}{|t|} \cos(ka)} dk - \frac{a\Delta t}{|t|\pi} f_1 \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{\cos(kna)}{1 + \rho + \frac{t}{|t|} \cos(ka)} dk = \\ &\equiv -\frac{a\Delta t}{\pi |t|} f_0 J_1(n) - \frac{a\Delta t}{|t|\pi} f_1 J_0(n) \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

donde en la penúltima igualdad hemos tomado en cuenta la paridad del integrando.

Consideremos la integral

$$J_0(n) \equiv \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{\cos(kna)}{1 + \rho + \frac{t}{|t|} \cos(ka)} dk = \frac{1}{a(1+\rho)} \int_0^{\pi} \frac{\cos(nx)}{1 + A \cos(x)} dx \quad (\text{B.16})$$

donde hemos definido $x = ka$ y $A = \frac{t}{|t|(1+\rho)}$. En tablas (Gradshteyn y Ryzhik, 1980) encontramos que

$$\int_0^{\pi} \frac{\cos(nx)}{1 + A \cos(x)} dx = \frac{\pi}{\sqrt{1-A^2}} \left(\frac{\sqrt{1-A^2}-1}{A} \right)^n \quad (\text{B.17})$$

si $A^2 < 1$. Esta última condición se cumple para estados apareados ($\rho > 0$) y en consecuencia

$$J_0(n) = \frac{\pi}{a} \frac{1}{\sqrt{(1+\rho)^2-1}} \left(\frac{|t|}{t} \right)^n \left[\sqrt{(1+\rho)^2-1} - (1+\rho) \right]^n \quad (\text{B.18})$$

De manera análoga podemos escribir

$$\begin{aligned} J_1(n) &\equiv \int_0^{\frac{\pi}{a}} \frac{\cos(kna) \cos(ka)}{1 + \rho + \frac{t}{|t|} \cos(ka)} dk = \frac{1}{a(1+\rho)} \int_0^{\pi} \frac{\cos(nx) \cos(x)}{1 + A \cos(x)} dx = \\ &= \frac{1}{2a(1+\rho)} \int_0^{\pi} \frac{\cos([n-1]x)}{1 + A \cos(x)} dx + \frac{1}{2a(1+\rho)} \int_0^{\pi} \frac{\cos([n+1]x)}{1 + A \cos(x)} dx = \\ &= \frac{\pi}{2a} \frac{\left[\sqrt{(1+\rho)^2-1} - (1+\rho) \right]^{n-1} + \left[\sqrt{(1+\rho)^2-1} - (1+\rho) \right]^{n+1}}{\sqrt{(1+\rho)^2-1}} \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Esta última expresión es válida únicamente para $n > 0$. Simplificando

$$\begin{aligned} J_1 &= -\frac{\pi}{a} \frac{(1+\rho)}{\sqrt{(1+\rho)^2-1}} \left(\frac{|t|}{t} \right)^{n+1} \left[\sqrt{(1+\rho)^2-1} - (1+\rho) \right]^n = \\ &= -J_0(1+\rho) \frac{|t|}{t} \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Sustituyendo (B.18), (B.20), (B.11), y (B.5) en (B.15), y simplificando

$$f_n = \left[\sqrt{(1 + \rho)^2 - 1} - (1 + \rho) \right]^n \left(\frac{|t|}{t} \right)^n \frac{(t + \Delta t)}{t} f_0 \quad (\text{B.21})$$

donde ρ está dada por la ecuación (B.8) y $n > 0$. Puesto que $t = t_0 - 2\Delta t$, para $\Delta t < 0.5t_0$, $\frac{|t|}{t} = 1$ y las amplitudes f_n tienen siempre el mismo signo, mientras que para $\Delta t > 0.5t_0$, $\frac{|t|}{t} = -1$ y las amplitudes f_n tienen signos opuestos entre sitios consecutivos.

Cabe señalar que la solución analítica de la función de Green en sistemas periódicos unidimensionales es útil para estudiar otras cantidades físicas, tal es el caso de la solución analítica del transporte cuántico difusivo dentro del formalismo de Kubo (Oviedo-Roa, *et al.*, 2000; Wang, *et al.*, 2001). Por último, usando el método presentado en este apéndice, también es posible obtener una solución analítica para dos partículas en una dimensión interaccionando por medio del modelo de Hubbard estándar ($V = \Delta t = 0$) (Pérez, 1995).

Referencias

- Adler D., 1968, *Solid State Physics*, Vol. 21, Eds. H. Ehrenreich, F. Seitz y D. Turnbull (Academic Press, New York).
- Ando, Y., Boebinger, G. S., Passner, A., Wang, N. L., Geibel, C., y Steglich, F., 1996, *Phys. Rev. Lett.* **77** 2065.
- Andersen, O.K., A.I. Liechtenstein, O. Jepsen y F. Paulsen, 1995, *J. Phys. Chem. Solids* **56**, 1573.
- Anderson, P.W., 1963, *Solid State Physics* **14**, 99.
- Anderson, P.W., 1987, *Science* **235**, 1196.
- Annett, J. F., N. D. Goldenfeld, and A. J. Leggett, 1996, en *Physical Properties of High-Temperature Superconductors V*, editado por D. M. Ginsberg (World Scientific, Singapore).
- Appel J., M. Grodziki, y F. Paulsen, 1993, *Phys. Rev. B* **47** 2812.
- Arrachea, L., y A.A. Aligia, 1997, *Physica C* **289**, 70.
- Arrachea, L., y A.A. Aligia, 1999, *Phys. Rev. B* **59**, 1333 .
- Ashcroft N. W. y N. D. Mermin, 1976, *Solid State Physics*, (Holt, Rinehart and Winston, New York).
- Auerbach, A., 1994, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer-Verlag).
- Balanchandra A.P., E. Ercolessi, G. Morandi y A.M. Srivastava, 1990, *Int. J. Mod. Phys. B4*, 2057 .
- Bardeen J., L. N. Cooper y J. R. Schrieffer, 1957, *Phys. Rev* **106**, 162.
- Batlogg, B., 1998, *Solid State Commun.* **107**, 639.
- Bednorz, J.G. y Müller, K.A., 1986, *Z. Physik B* **64**, 189.
- Blaer, A.S., H.C. Ren, y O. Tchernyshyov, 1997, *Phys. Rev. B* **55**, 6035.
- Caffarel, M. y R. Mosseri, 1998, *Phys. Rev. B* **57**, R12651.
- Carbotte, J. P., 1990, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 1027.
- Chen, L., y C. Mei, 1989, *Phys. Rev. B* **39**, 9006.
- Chien, T. R., W. R. Datars, M. D. Lan, J. Z. Liu, y R. N. Shelton, 1994, *Phys. Rev. B* **49**, 1342.
- Chung, T.C. et al. 1984, *Phys. Rev. B* **30**, 702.
- Chu, C.W., L. Gao, F. Chen, Z.J. Huang, R.L. Meng, Y.Y. Xue, 1993, *Nature* **365**, 323.
- Clarke, D. G., S. P. Strong, y P. W. Anderson, 1995, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4499.
- Cooper, L. N., 1956, *Phys. Rev.* **104**, 1189.
- Dagotto, E., 1994a, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763.
- Dagotto, E., J. Riera, Y. C. Chen, A. Moreo, A. Nazarenko, F. Alcaraz, y F. Ortolani, 1994b, *Phys. Rev. B* **49**, 3548.
- Dagotto, E., A. Nazarenko, y A. Moreo, 1995, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 310.
- Devereaux, T. P., D. Einzel, B. Stadlober, R. Hackl, D. H. Leach, y J. J. Neumeier, 1994, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 396.
- Devereaux, T. P., y D. Einzel, 1995, *Phys. Rev. B* **51**, 16336.
- Ding H., M.R. Norman, J.C. Campuzano, M. Randeria, A.F. Bellman, T. Yokoya, T. Takahashi, T. Mochiku, and K.Kadowaki, 1996, *Phys. Rev. B* **54**, R9678.
- Eagles, D.M., 1969, *Phys. Rev.* **186**, 456.
- Economou E.N., 1983, *Green's Functions in Quantum Physics*, (Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 7).
- Enz C. P., 1992, *A Course on Many Body Theory applied to Solid State Physics*, Lecture Notes in Physics, Vol. 11 (World Scientific, Singapore).
- Entel, P. y J. Zielinsky, 1990, *Phys. Rev. B* **42**, 307.
- Emery, V.J., 1987, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794.
- Emery, V.J., Kivelson, S.A., y Zachar, O., 1997, *Physica C* **282-287**, 174.
- Fabrizio, M., A. Parola, y E. Tosatti, 1991, *Phys. Rev. B* **44**, 1033.

- Falicov L.M. y F.Indurain, 1975, *J. Phys. C* **8**, 147.
- Fetter, A.L. y J. D. Walecka, 1971, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, (McGraw-Hill).
- Foglio, M.E. y L.M. Falicov, 1979, *Phys. Rev. B* **20**, 4554.
- Fujimoto S., 2001, *Phys. Rev. B* **64**, 085102.
- Fulde, P., 1991, *Electron Correlations in Molecules and Solids*, (Springer-Verlag).
- Ginzburg, V. L., 2000, *J. of Superconductivity*, **13**, 665.
- Gough, C. E., M. S. Colclough, E. M. Forgan, R. G. Jordan, M. Keene, C. M. Muirhead, A. I. M. Rae, N. Thomas, J. S. Abell, y S. Sutton, 1987, *Nature (London)* **326**, 855.
- Gradshteyn I.S. e I.M. Ryzhik, 1980, *Table of integrals, series and products*, (Academic Press, New York).
- Hirsch, J.E., 1989, *Phys. Lett. A* **136**, 163.
- Hirsch, J.E., y F. Marsiglio, 1989, *Phys. Rev. B* **39**, 11515.
- Hirsch, J. E. y S. Tang, 1989b, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 591.
- Hirsch, J.E., 1991, *Physica C* **179**, 317.
- Hirsch, J.E., 2000, *Phys. Rev. B* **62**, 14487.
- Hirsch, J.E., 2001, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 206402.
- Hohenberg, P. C., 1967, *Phys. Rev.* **158**, 383.
- Hubbard J., 1963, *Proc. Roy. Soc.* **A276**, 238.
- Hybertsen, M. S., E. B. Stechel, M. Schluter y D. R. Jennison, 1990, *Phys. Rev. B* **41**, 11068.
- Imada, M., A. Fujimori, y Y. Tokura, 1998, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039.
- Inui, T., Y. Tanabe, y Y. Onodera, 1995, *Group Theory and Its Applications in Physics*, 2a. edición, Springer Series in Solid State Sciences, Vol. 78 (Springer-Verlag).
- Jannossy, B., R. Hergt, and L. Fruchter, 1990, *Physica C* **170**, 22.
- Josephson, B. D., 1962, *Phys. Lett.* **1**, 251.
- Julien, M.-H., P. Carretta, M. Horvatic, C. Berthier, Y. Berthier, P. Segrasan, A. Carrington, y D. Colson, 1996, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4238.
- Kane J. y K.W. Ng, 1996, *Phys. Rev. B* **53**, 2819.
- Kane J., K.W. Ng, y D. Moecher, 1998, *Physica C* **294**, 176.
- Keene, M. N., T. J. Jackson, y C. E. Gough, 1989, *Nature (London)* **340**, 210.
- Kitano, H., T. Hanaguri, and A. Maeda, 1998, *Phys. Rev. B* **57**, 10946.
- Kittel C., 1996, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons).
- Kocharian, A.N., C. Yang y Y.L. Chiang, 1999, *Phys. Rev. B* **59**, 7458.
- Kresin V.Z., and S.A. Wolf, 1990, *Fundamentals of Superconductivity* (Plenum Publishing Corporation).
- Kusunose H., S. Yotsuhashi, and K. Miyake, 2000, *Phys. Rev. B* **62**, 4403.
- Lieb E. y F.Y. Wu, 1967, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1315.
- Liechtenstein, A. I., O. Gunnarsson, O. K. Andersen, y R. M. Martin, 1996, *Phys. Rev. B* **54**, 12505.
- Lin, H. Q. y J. E. Hirsch, 1987, *Phys. Rev. B* **35**, 3359.
- Littlewood, P. B., C. M. Varma, y E. Abrahams, 1987, *Phys. Rev. B* **63**, 379.
- Ma, J., C. Quitmann, R. J. Kelley, H. Berger, G. Margaritondo, y M. Onellion, 1995, *Science* **267**, 862.
- Mahan, G.D., 1990, *Many-Particle Physics* (Plenum Press).
- Maple, M.B., 1998, *J. of Mag. Mag. Mat.*, **177**, 18.
- Marder M.P., 2000, *Condensed Matter Physics* (John Wiley & Sons).

- Marsiglio, F., y J.E. Hirsch, 1990a, *Physica C* **165**, 71.
- Marsiglio, F., y J.E. Hirsch, 1990b, *Physica C* **171**, 554.
- Mattis, D. C., 1985, *The Theory of Magnetism II*, (Springer-Verlag), p.40-41.
- Mesot, J., M. R. Norman, H. Ding, M. Randeria, J. C. Campuzano, A. Paramekanti, H. M. Fretwell, A. Kaminski, T. Takeuchi, T. Yokoya, T. Sato, T. Takahashi, T. Mochiku, y K. Kadowaki, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 840.
- Micnas, R., S. Robaszkiewicz y K. A. Chao, 1984, *Phys. Rev. B*, **29**, 2784.
- Micnas, R., J. Ranninger, S. Robaszkiewicz y S. Tabor, 1988, *Phys. Rev. B*, **37**, 9410.
- Micnas, R., J. Ranninger, y S. Robaszkiewicz, 1989, *Phys. Rev. B*, **39**, 11653.
- Micnas, R., J. Ranninger, y S. Robaszkiewicz, 1990, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 113.
- Micnas, R., S. Robaszkiewicz y B. Tobijaszewska, 1999, *J. of Superconductivity* **12**, 79.
- Merzbacher E., 1970, *Quantum Mechanics* (John Wiley).
- Metzner, W. y D. Vollhardt, 1989, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324.
- Monthoux, P., y D.J. Scalapino, 1994, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1874.
- Navarro O. y C. Wang, 1992a, *Rev. Mex. Fís.* **38**, 553.
- Navarro O. y C. Wang, 1992b, *Solid State Commun.* **83**, 473.
- Nazarenko, A., A. Moreo, E. Dagotto, y J. Riera, 1996, *Phys. Rev. B* **54**, R768.
- Nozières P., A., y S. Schmitt-Rink, 1985, *J. of Low Temp. Phys.* **59**, 195.
- Ong, N. P., Y. F. Yan, and J. M. Harris, 1995, in *High-Tc Superconductivity and the C60 Family*, editado por S. Feng y H. C. Ren (Gordon and Breach, Newark, NJ), p. 53.
- Orenstein, J. y A.J. Mills, 2000, *Science* **288**, 468.
- Oviedo-Roa R., C. Wang y O. Navarro, 1996, *J. of Low Temp. Phys.* **105**, 651.
- Oviedo-Roa R., L. A. Pérez y C. Wang, 2000, *Phys. Rev. B* **62**, 13805.
- Pathria, R.K., 1972, *Statistical Mechanics*, (Pergamon Press, London).
- Peierls, R. E., 1955, *Quantum Theory of Solids*, (Oxford University Press).
- Pérez, L.A., 1995, *Tesis Licenciatura*, Universidad Nacional Autónoma de México.
- Pérez, L.A., O. Navarro, y C. Wang, 1996, *Phys. Rev. B* **53**, 15389.
- Pérez, L.A., y C. Wang, 1998a, *Solid State Commun.* **108**, 215.
- Pérez, L.A., y C. Wang, 1998b, *J. of Mag. Mag. Mat.* **177**, 215.
- Pérez, L.A., y C. Wang, 1999, *Physica B* **259**, 771.
- Pérez, L.A., y C. Wang, 2000, *J. of Superconductivity* **13**, 925.
- Pérez, L.A., y C. Wang, 2001, *Solid State Commun.* **118**, 589.
- Pérez, L.A., y C. Wang, 2002a, *Solid State Commun.* **121**, 669.
- Pérez, L.A., y C. Wang, 2002b, enviado para su publicación.
- Pickett, W. E., 1989, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 433.
- Poole Jr., C.P., H.A. Farach y R.J. Creswick, 1995, *Superconductivity*, Academic Press pág. 66.
- Presland M.R., J.L. Tallon, R.G. Buckley, R.S. Liu y N.E. Flower, 1991, *Physica C* **176**, 95.
- Randeria, M., J.-M. Muan, y L.-Y. Shieh, 1990, *Phys. Rev. B* **41**, 327.
- Randeria, M., 1995, en *Bose-Einstein Condensation*, editado por A. Griffin, *et al.*, Cambridge University Press.
- Revaz, B., J.-Y. Genoud, A. Junod, K. Neumaier, A. Erb, y E. Walker, 1998, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3364.
- Rickayzen, G., 1965, *Theory of Superconductivity* (Wiley, New York).
- Rubio-Ponce, A. y R. Baquero, 2001, *Rev. Mex. Fís.* **47**, 447.
- Sánchez, V., L. A. Pérez, R. Oviedo-Roa y C. Wang, 2001, *Phys. Rev. B* **64**, 174205.

- Scalapino, D.J., 1995, Phys. Rep. **250**, 329.
- Strack, R., y Vollhardt, D., 1993, Phys. Rev. Lett. **70**, 2637.
- Schüttler, H.-B., y Fedro, A.J., Phys. Rev. B **45**, 1992, 7588.
- Shen, Z. X., D. S. Dessau, B. O. Wells, D. M. King, W. E. Spicer, A. J. Arko, D. Marshall, L. W. Lombardo, A. Kapitulnik, P. Diskinson, S. Doniach, J. DiCarlo, A. G. Loeser, y C. H. Park, 1993, Phys. Rev. Lett. **70**, 1553.
- Shen, Z. X., y D. S. Dessau, 1995, Phys. Rep. **253**, 1.
- Shih, C.T., Y.T. Chen, H.Q. Lin, y T.K. Lee, 1998, Phys. Rev. Lett. **81**, 1294.
- Simón, M. E., A. A. Aligia, y E. R. Gagliano, 1997, Phys. Rev. B **56**, 5637.
- Su G., y M. Suzuki, 1998, Phys. Rev. B **58**, 117.
- Tajima, S., J. Schützmann, S. Miyamoto, I. Terasaki, Y. Sato y R. Hauff, 1997, Phys. Rev. B **55**, 6051.
- Timusk T., y B. Statt, 1999, Rep.Prog.Phys. **62**, 61.
- Tinkham, M., 1996, *Introduction to Superconductivity*, 2nd. edition (McGraw-Hill, Inc., New York) pp. 53.
- Trugman S.A., 1990, en *Applications of Statistical and Field Theory Methods to Condensed Matter*, Ed. by D. Baeriswyl, et al., (Plenum Press, New York) pág. 253.
- Tsuei, C. C., J. R. Kirtley, C. C. Chi, Lock See Yu-Jahnes, A. Gupta, T. Shaw, J. Z. Sun, y M. B. Ketchen, 1994, Phys. Rev. Lett. **73**, 593.
- Tsuei, C. C., y J.R. Kirtley, 2000, Rev. Mod. Phys. **72**, 969.
- Uchida, S., K. Tamasaku, K. Takenaka, and H. Takagi, 1994, J. Low Temp. Phys. **95**, 109.
- Uemura, Y.J., et al., 1993, Nature **364**, 605.
- Walstedt, R. E., y W. W. Warren, Jr., 1990, Science **248**, 1082.
- Wang, C., 1989, *Tesis Doctoral*, Universidad Nacional Autónoma de México.
- Wang, C., R. Oviedo-Roa R., V. Sánchez y L. A. Pérez, 2001, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **643**, K9.20.
- Wollman, D. A., Van Harlingen, D. J., Lee, W. C., Ginsberg, D. M., y Leggett, A.J., 1993, Phys. Rev. Lett. **71**, 2134.
- Wright, D. A., J. P. Emerson, B. F. Woodfield, J. E. Gordon, R. A. Fisher, y N. E. Phillips, 1999, Phys. Rev. Lett. **82**, 1550.
- Wu, M.K., J.R. Ashburn, C.J. Tornq, P.H. Hor, R.L. Meng, L. Gao, Z.J. Huang, Y.Q. Wang y C.W. Chu, 1987, Phys. Rev. Lett. **58**, 908.
- Yeh, N.-C., C.-T. Chen, G. Hammerl, J. Mannhart, A. Schmehl, C. W. Schneider, R. R. Schulz, S. Tajima, K. Yoshida, D. Garrigus, y M. Strasik, 2001, Phys. Rev. Lett. **87**, 087003.
- Yu, J., S. Massidda, y A.J. Freeman, 1988, Physica C **152**, 273.
- Yurgens, A., D. Winkler, N. V. Zavaritsky, y T. Claeson, 1997, Phys. Rev. Lett. **79**, 5122.
- Zhang, F.C. y T. M. Rice, 1988, Phys. Rev. B **37**, 3759.
- Ziman, J.M., 1979, *Principles of the Theory of Solids*, (Cambridge University Press).