



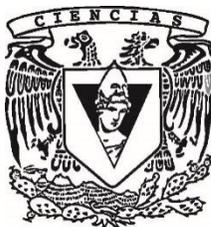
UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**Estudio de multipares electrónicos
más allá de la aproximación de
campo medio**

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
F Í S I C O
P R E S E N T A :

**CARLOS ALBERTO MACIEL
ESCUADERO**



DIRECTOR DE TESIS:
DR. CHUMIN WANG CHEN

México, D.F.

2015



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.

Datos Generales

1. Datos del alumno

Maciel

Escudero

Carlos Alberto

56 88 02 66

Universidad Nacional Autónoma de México

Facultad de Ciencias

Física

305615774

2. Datos del tutor

Dr

Chumin

Wang

Chen

3. Datos del sinodal 1

Dr

Mauricio

Fortes

Besprosvani

4. Datos del sinodal 2

Dr

Luis Antonio

Pérez López

5. Datos del sinodal 3

Dr

Oracio

Navarro

Chávez

6. Dr

Carlos

Ramírez

Ramos

7. Datos del trabajo escrito

Estudio de multipares electrónicos más allá de la aproximación de campo medio

66 p

2015

A mi madre Zorayda

Por quererme y mostrarme que no existen metas inalcanzables

A mi hermana Zorayda

Por apoyarme y enseñarme que la vida sin retos no es vida

A Nora

Por todo el tiempo que estuvimos juntos y mostrarme que los sueños se hacen realidad

Agradecimientos

Agradezco al Dr. Chumin Wang Chen por el tiempo que dedicó a la revisión de esta tesis, por sus valiosos comentarios y enseñanzas que permitieron ampliar mi perspectiva sobre el tema y de forma muy especial por su apoyo para que mi estancia como estudiante fuera la mejor.

A los profesores que integran el jurado: Dr. Mauricio Fortes Besprosvani, Dr. Luis Antonio Pérez López, Dr. Oracio Navarro Chávez y al Dr. Carlos Ramírez Ramos. Por su tiempo y buenos consejos que lograron hacer de mi un mejor profesionista. También quisiera agradecer a la Dra. Vicenta Sánchez por su disposición a siempre ayudarme.

A la Dirección General de Asuntos del Personal Académico de la UNAM por la beca que me proporcionó para la realización de esta tesis mediante el proyecto PAPIIT IN113714.

Al Instituto de Investigaciones en Materiales por el buen trato que me dieron y su disposición para ayudarme en cualquier adversidad.

A la Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación de la UNAM por permitirme utilizar la supercomputadora Miztli donde se realizaron muchos de los cálculos numéricos presentados en la tesis.

Quiero aprovechar para agradecer a mis compañeros de cubículo Marisol, Jorge y Pedro y al equipo de corredores: César, Alessio, Ángel, Lalo y Adrián por su incondicional apoyo y amistad.

Gracias a mi amigos Héctor, Alonso, Rebeca, Miguel, Estefanía, Tito, Kuri, Tort, Teresa, Luis Enrique, Jose Luis y a todos mis amigos de la UP por compartir los malos y buenos momentos.

Resumen

Esta tesis tiene como objetivo estudiar la solución propuesta por R. W. Richardson para el hamiltoniano de BCS, la cual establece una forma de transformar dicho hamiltoniano de N pares de electrones a un problema de N ecuaciones algebraicas no lineales y acopladas. Experimentos recientes en superconductividad de granos ultra pequeños han demostrado que en sistemas de baja dimensionalidad y altas temperaturas las predicciones del campo medio difieren significativamente respecto a los resultados experimentales. Por esto surge la importancia del formalismo de Richardson para estudiar sistemas con un número reducido de grados de libertad más allá de la aproximación de campo medio.

En esta tesis se presenta un método general para obtener las ecuaciones de Richardson para un sistema de N pares de electrones y M niveles de energía. Asimismo, se presenta la solución analítica de dichas ecuaciones para un sistema de dos pares y dos niveles de energía.

Dado la forma de las ecuaciones de Richardson, es complicado obtener una solución analítica general, aún para sistemas con un número reducido de pares. Por lo que se desarrolló un software para el análisis numérico de dichas ecuaciones, con el cual se investigó el comportamiento de los parámetros R_i y de la energía total del sistema.

Los resultados muestran que el problema de muchos pares presenta un fenómeno de formación de bipares colectivos que permite cruzar las barreras del nivel de menor energía más próximo con el fin de reducir la energía total del sistema. Además, el estudio del comportamiento de los bipares sugiere una fuerte codependencia entre los pares colectivos que forman dicho bipolar. Por otro lado, el análisis del número de niveles de energía revela una clara repulsión cuántica y apunta a la existencia de un comportamiento límite cuando el número de niveles tiende a infinito. Asimismo, la transformación de Richardson tiene como consecuencia que el tiempo de cómputo en función del número de pares disminuya significativamente en comparación con el tiempo de diagonalización directa de matrices que se deriva de la ecuación de Schrödinger de muchas partículas. Por lo que las ecuaciones de Richardson sí representan una simplificación para encontrar la solución numérica del problema con interacción electrón-electrón constante.

Contenido

Introducción	1
Capítulo 1	3
PROBLEMA CUÁNTICO DE MUCHOS CUERPOS	3
1.1. Formalismo de la segunda cuantización	4
1.2. Excitaciones elementales en sólidos	7
1.3. Aproximación de campo medio	10
Capítulo 2	13
FORMACIÓN DE PARES	13
2.1. Pares de Cooper	14
2.2. Campo medio de pares	19
2.3. Teoría BCS de la superconductividad	20
Capítulo 3.	26
MULTIPARES CORRELACIONADOS	26
3.1. Ecuaciones de Richardson	26
3.2. Solución analítica de la energía total	33
3.3. Resultados numéricos para N pares	36
Conclusiones	46
Apéndice A. Pares colectivos de Richardson	47
Apéndice B. Código	50
Referencias	59

Introducción

La superconductividad en sistemas cuánticos confinados ha sido materia de investigación durante las últimas décadas. Sin embargo, resultados recientes impulsados por desarrollos tecnológicos han llamado de nuevo la atención en este campo. Pues se sabe que mientras la dimensión del sistema se reduce más allá de la longitud de coherencia superconductora, aparecen desviaciones en el comportamiento predicho por la aproximación de campo medio debido a fluctuaciones cuánticas y térmicas, afectando la transición superconductora. Particularmente, en un superconductor con todas sus dimensiones menores que la longitud de coherencia, los efectos de fluctuación conducen a un régimen crítico que pueden observarse a través de mediciones en nanopartículas individuales superconductoras. Los experimentos muestran que en efecto existe desviación de los resultados medidos con respecto a los predichos por BCS al estudiar nanopartículas pequeñas alrededor de 13 nm de diámetro [Brihuega, 2011].

En esta tesis se presenta un estudio más allá de la aproximación de campo medio del problema de N pares electrónicos basado en la solución propuesta por el físico R. W. Richardson al estudiar la formación de pares dentro del núcleo atómico [Richardson, 1963]. Él encontró una transformación que convierte la ecuación de Schrödinger para el hamiltoniano de pares con interacción constante, a un problema de ecuaciones algebraicas no lineales acopladas. A este conjunto de ecuaciones se les conoce con el nombre de la solución de Richardson.

El primer capítulo de esta tesis está dedicado a discutir las bases necesarias para abordar el problema de muchos cuerpos dentro del formalismo de la segunda cuantización. Además, se presentan las excitaciones colectivas que aparecen con mayor frecuencia dentro del estudio de los sólidos para describir los estados excitados cercanos al estado base. Como ejemplos de dichas excitaciones colectivas, se presentan los fonones, magnones, plasmones, polarones y polaritones. Una de las aproximaciones más utilizadas en el problema de muchos cuerpos es la de campo medio, el cual reduce el problema de muchas partículas interactuantes a un problema de una sola partícula inmersa en el campo producido por todas las demás. Dicha aproximación se discute al final del capítulo.

El segundo capítulo está dedicado al estudio de la formación de pares electrónicos, también conocidos como pares de Cooper. El capítulo inicia con el problema que resolvió

Leon Cooper, en el cual se demuestra que la superficie de Fermi es inestable ante una interacción atractiva entre electrones, formándose así un estado ligado de un par de Cooper. Para que la interacción entre electrones sea atractiva se emplea el modelo de interacción electrón-electrón vía fonón propuesto Fröhlich en 1950. Por otro lado, se presenta la aproximación de campo medio para pares de Cooper, considerando uno de ellos inmerso en un campo promedio de las demás partículas. Partiendo de un hamiltoniano escrito en dicha aproximación, en la última sección del capítulo se discute la teoría BCS usando la transformación unitaria de Bogoliubov-Valantin, con la cual se obtiene la ecuación para la brecha superconductora.

Finalmente, en el tercer capítulo se presentan los resultados tanto analíticos como numéricos basados en las ecuaciones de Richardson. El capítulo comienza con la deducción de las ecuaciones de Richardson para uno, dos y N pares en M niveles de energía. En particular, se obtuvo una solución analítica para el caso de dos pares de Cooper y dos niveles de energía. En la última sección, se presentan los resultados numéricos obtenidos al resolver las ecuaciones de Richardson variando el número de pares, el número de niveles energéticos, la degeneración del sistema y la configuración de los pares. Asimismo, se analiza el escalamiento del tiempo de cómputo con el tamaño del sistema de muchos pares.

Capítulo 1

PROBLEMA CUÁNTICO DE MUCHOS CUERPOS

Uno de los grandes retos en la Física es resolver en forma exacta el problema de muchos cuerpos interactuantes. Dicho problema se traduce en el caso cuántico a encontrar la función de onda para un sistema de N partículas, dado un hamiltoniano típicamente de la forma [Fetter, 2003]

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{T}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \hat{V}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j). \quad (1.1)$$

Similar a su contraparte en la mecánica clásica, este problema no ha logrado hasta la fecha resolverse satisfactoriamente cuando la energía cinética es comparable con la energía potencial en la ecuación (1.1).

En este primer capítulo se introduce el lenguaje natural que se utiliza para describir un sistema formado por muchas partículas, conocido también como el formalismo de la segunda cuantización, así como el concepto de las excitaciones elementales en sólidos. Dado que no se ha encontrado solución exacta para el problema de muchos cuerpos, el método aproximado más utilizado es el de campo medio discutido en la segunda sección, que analiza la interacción que experimenta una partícula debido a la presencia de las demás, es decir, considera dicha partícula inmersa en un campo promedio producido por las restantes como se muestra en la Figura 1.1. Al final del capítulo se presentan explícitamente algunos formalismos de campo medio para abordar el problema de muchos cuerpos.

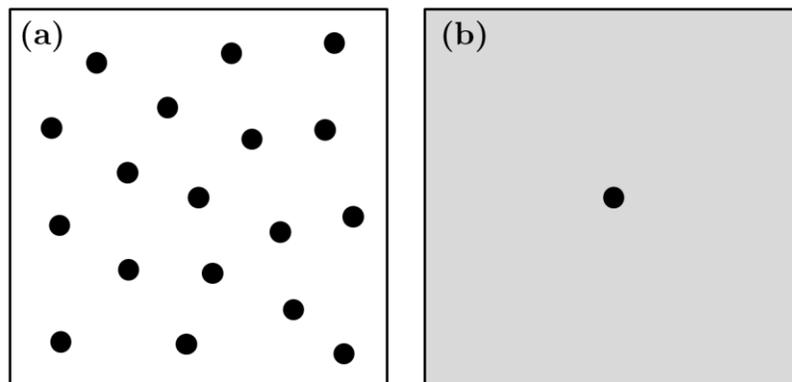


Figura 1.1. (a) Esquema de 18 partículas interactuantes y (b) una partícula representante inmersa en el campo medio (fondo gris) producido por las partículas restantes.

1.1. Formalismo de la segunda cuantización

En la mecánica cuántica tradicional, los espectros de algunas observables representadas por operadores hermíticos se encuentran cuantizados, tales como la energía y el momento de una partícula confinada en una región espacial. La segunda cuantización es una descripción cuántica de un campo, entendiendo este último como una cantidad definida para cada punto del espacio y tiempo [Tong, 2006]. Por ejemplo, el campo electromagnético y el campo vibracional de los sólidos pueden describirse dentro del formalismo de la segunda cuantización a través de las cuasipartículas llamadas fotones y fonones, respectivamente. Actualmente la mecánica cuántica de muchos cuerpos se encuentra formulada en términos de la segunda cuantización, basada en la representación del número de ocupación así como en los operadores de creación y aniquilación. La idea de dicha representación parte de que la función de onda de muchas partículas siempre puede expresarse como una combinación lineal de productos de funciones de onda de una sola partícula, por ejemplo a través de la suma de determinantes de Slater para el caso fermiónico [Bruus, 2004].

El problema de muchos cuerpos dentro del lenguaje de la segunda cuantización se aborda expresando el número de partículas presentes en cada uno de los orbitales, es decir, estados de una sola partícula. En otras palabras, el estado de N partículas está dado por

$$|n_{v_1}, n_{v_2}, n_{v_3}, \dots\rangle, \quad (1.2)$$

donde n_{v_i} es el número de partículas que se encuentra en el estado v_i y $\sum_{v_i} n_{v_i} = N$. Además, se define el operador de número de ocupación \hat{n}_{v_i} que cuenta el número de partículas que se encuentran en el estado v_i , es decir,

$$\hat{n}_{v_i} |n_{v_1}, n_{v_2}, n_{v_3}, \dots\rangle = n_{v_i} |n_{v_1}, n_{v_2}, n_{v_3}, \dots\rangle, \quad (1.3)$$

con

$$n_{v_i} = \begin{cases} 0, 1 & \text{fermiones} \\ 0, 1, 2, \dots & \text{bosones} \end{cases}. \quad (1.4)$$

Al espacio generado por estos estados se le conoce con el nombre de espacio de Fock (\mathcal{F}) que puede definirse como la suma directa

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2 \oplus \dots, \quad (1.5)$$

donde \mathcal{F}_N es el espacio generado por los vectores de $|n_{v_1}, n_{v_2}, n_{v_3}, \dots\rangle$ con $\sum_{v_i} n_{v_i} = N$. Además del operador de número, dentro del formalismo de la segunda cuantización, se introducen dos operadores que permiten “crear” y “destruir” partículas en los estados de

una sola partícula ν_i , conocidos como operadores de creación y aniquilación, como se muestra esquemáticamente en la Figura 1.2. Es importante realizar una distinción entre fermiones y bosones destacando la simetría y antisimetría de la función de onda, respectivamente. Para el caso bosónico se tiene que

$$\left|n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_i}, \dots, n_{\nu_j}, \dots\right\rangle = \left|n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_j}, \dots, n_{\nu_i}, \dots\right\rangle. \quad (1.6)$$

Entonces, el operador bosónico de creación, como su nombre lo indica, coloca una partícula en el estado ν_i de forma que [Bruus, 2004]

$$\hat{b}_{\nu_i}^\dagger \left|n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_i}, \dots\right\rangle = \sqrt{1+n_{\nu_i}} \left|n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_i}+1, \dots\right\rangle. \quad (1.7)$$

Análogamente, el operador bosónico de aniquilación retira una partícula del estado ν_i ,

$$\hat{b}_{\nu_i} \left|n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_j}, \dots\right\rangle = \sqrt{n_{\nu_i}} \left|n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_j}-1, \dots\right\rangle. \quad (1.8)$$

De hecho, este operador es el adjunto del operador de creación,

$$\hat{b}_{\nu_i} = \left(\hat{b}_{\nu_i}^\dagger\right)^\dagger. \quad (1.9)$$

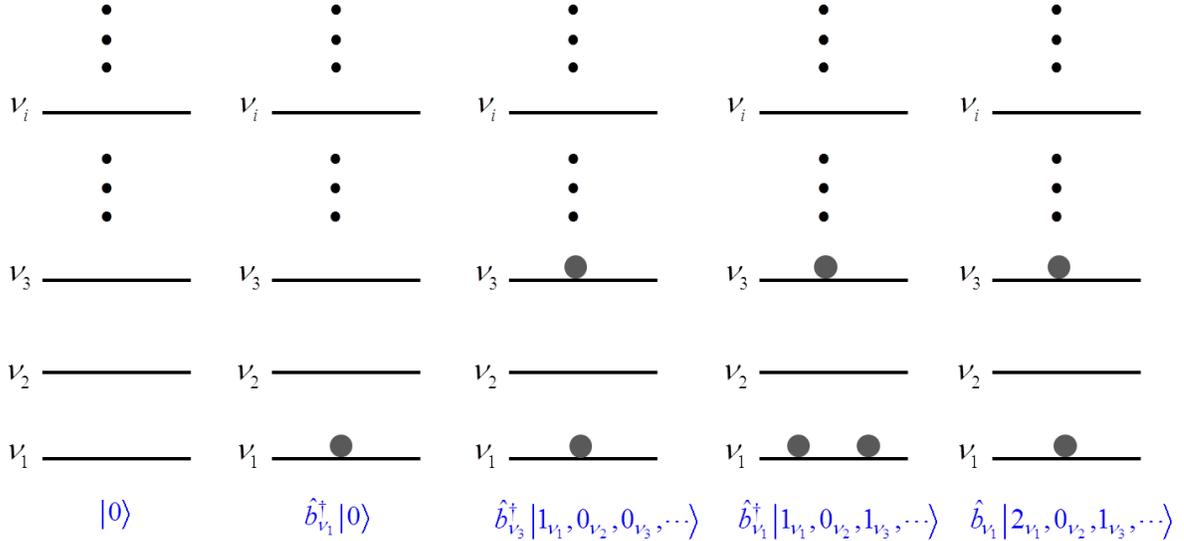


Figura 1.2. Esquema de la forma en que operan los operadores de creación y aniquilación en el formalismo de la segunda cuantización. Empezando en el estado vacío, primero se crea una partícula en el estado ν_1 y luego otra en el estado ν_3 . A partir del último estado se crea otra en el orbital ν_1 para luego ser aniquilada. Finalmente resulta el estado con dos partículas, una en el estado ν_1 y la otra en el estado ν_3 .

De lo anterior, se tiene que estos dos operadores forman un álgebra dada por las siguientes reglas de conmutación

$$\left[\hat{b}_{\nu_i}^\dagger, \hat{b}_{\nu_j}^\dagger\right] = 0, \quad \left[\hat{b}_{\nu_i}, \hat{b}_{\nu_j}\right] = 0, \quad \left[\hat{b}_{\nu_i}, \hat{b}_{\nu_j}^\dagger\right] = \delta_{\nu_i, \nu_j}, \quad (1.10)$$

donde $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ es el conmutador de los operadores \hat{A} y \hat{B} . A partir de las relaciones (1.7) y (1.8) se tiene que $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ es el operador de número \hat{n}_i .

Para el caso fermiónico, sucede algo parecido, sólo que ahora la función de onda ante el intercambio de numeración de las partículas debe ser antisimétrica. De forma que,

$$|n_{v_1}, n_{v_2}, \dots, n_{v_i}=1, \dots, n_{v_j}=1, \dots\rangle = -|n_{v_1}, n_{v_2}, \dots, n_{v_j}=1, \dots, n_{v_i}=1, \dots\rangle. \quad (1.11)$$

Introduciendo los operadores de creación y aniquilación fermiónicos, \hat{c}_i^\dagger y \hat{c}_i , respectivamente, se obtienen las relaciones similares a (1.5) y (1.6) con distintas constantes de normalización

$$\begin{aligned} \hat{c}_i^\dagger |n_{v_1}, n_{v_2}, \dots, n_{v_i}, \dots\rangle &= \sqrt{1-n_{v_i}} |n_{v_1}, n_{v_2}, \dots, n_{v_i}+1, \dots\rangle \\ \hat{c}_i |n_{v_1}, n_{v_2}, \dots, n_{v_i}, \dots\rangle &= \sqrt{n_{v_i}} |n_{v_1}, n_{v_2}, \dots, n_{v_i}-1, \dots\rangle \end{aligned}, \quad (1.12)$$

donde el operador de aniquilación es el adjunto del de creación. Los operadores fermiónicos obedecen las reglas de anticonmutación dadas por

$$\{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0, \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = 0, \quad \{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{v_i, v_j}. \quad (1.13)$$

donde $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ es el anticonmutador de los operadores \hat{A} y \hat{B} . Por lo tanto, para el caso de partículas con espín semientero los estados no están determinados únicamente por el número de partículas presentes, sino que el signo depende del orden en que se encuentran dichos estados. De (1.13) se sigue

$$(\hat{c}_i^\dagger)^2 = 0, \quad (\hat{c}_i)^2 = 0, \quad (1.14)$$

que recupera el principio de exclusión de Pauli para fermiones. En resumen, hay sólo dos formas en la mecánica cuántica para describir partículas indistinguibles:

$$\text{Bosones} \left\{ \begin{array}{l} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger - \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i^\dagger = 0 \\ \hat{b}_i \hat{b}_j - \hat{b}_j \hat{b}_i = 0 \\ \hat{b}_i \hat{b}_j^\dagger - \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i = \delta_{v_i, v_j} \\ n_{v_i} = 0, 1, 2, \dots \end{array} \right. \quad (1.15)$$

y

$$\text{Fermiones} \left\{ \begin{array}{l} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger + \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i^\dagger = 0 \\ \hat{c}_i \hat{c}_j + \hat{c}_j \hat{c}_i = 0 \\ \hat{c}_i \hat{c}_j^\dagger + \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i = \delta_{v_i, v_j} \\ n_{v_i} = 0, 1 \end{array} \right. \quad (1.16)$$

En general los operadores del hamiltoniano (1.1) pueden expresarse en términos de los operadores de creación y aniquilación. Por ejemplo, el operador de una sola partícula puede expresarse como

$$\hat{T} = \sum_{\nu_i, \nu_j} \langle \nu_i | \hat{T} | \nu_j \rangle \hat{c}_{\nu_i}^\dagger \hat{c}_{\nu_j}. \quad (1.17)$$

De forma que para el caso de operadores de dos partículas, como el operador de interacción electrón-electrón se expresa como

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\nu_i, \nu_j, \nu_k, \nu_l} \langle \nu_i, \nu_j | \hat{V} | \nu_k, \nu_l \rangle \hat{c}_{\nu_i}^\dagger \hat{c}_{\nu_j}^\dagger \hat{c}_{\nu_l} \hat{c}_{\nu_k}. \quad (1.18)$$

Además, dadas las bases $\{\nu_i\}$ y $\{\bar{\nu}_i\}$ de un sola partícula. Se puede ver que los operadores de creación y aniquilación entre una base y la otra, se relacionan como [Bruus, 2004]

$$\begin{aligned} \hat{c}_{\bar{\nu}_i}^\dagger &= \sum_{\nu_j} \langle \bar{\nu}_i | \nu_j \rangle^* \hat{c}_{\nu_j}^\dagger \\ \hat{c}_{\bar{\nu}_i} &= \sum_{\nu_j} \langle \bar{\nu}_i | \nu_j \rangle \hat{c}_{\nu_j}. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Hasta el momento se ha considerado que las partículas del sistema son las mismas, ya sean bosones o fermiones, pero únicamente de una sola especie. La técnica de segunda cuantización puede extenderse para el caso de un sistema formado por distintas partículas considerando un estado cualquiera como el producto externo de estado de un solo grupo, es decir,

$$|\psi\rangle = |\psi^{(1)}\rangle |\psi^{(2)}\rangle = |n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_j}, \dots\rangle |n_{\mu_1}, n_{\mu_2}, \dots, n_{\mu_i}, \dots\rangle, \quad (1.20)$$

donde $|\psi^{(1)}\rangle$ el estado del primer grupo de partículas con estados de una sola partícula ν_i y $|\psi^{(2)}\rangle$ el estado del segundo grupo de partículas con estados de una sola partícula μ_i [Bruus, 2004].

1.2. Excitaciones elementales en sólidos

En la física del estado sólido, las excitaciones elementales son cuasipartículas que permiten describir de forma sencilla los sistemas complejos. Para el caso del problema de muchos cuerpos, se introduce el concepto de excitaciones colectivas para describir los estados excitados cercanos al estado base, ya que es casi imposible determinar la dinámica de todos los cuerpos individualmente. Por ejemplo, el movimiento vibracional

de un sólido, en el cual cada átomo oscila alrededor de un punto de equilibrio, puede transformarse como un conjunto de modos normales de vibración colectiva, cuya cuasipartícula asociada se le conoce con el nombre de fonón con energía

$$E = \hbar\omega_{\mathbf{k}} \quad (1.21)$$

y momento cristalino

$$\hbar\mathbf{k}, \quad (1.22)$$

donde $\omega_{\mathbf{k}}$ es la frecuencia y \mathbf{k} el vector número de onda del fonón. Además, la conexión entre las ecuaciones (1.21) y (1.22), conocida como la relación de dispersión de las ondas, se encuentra determinada por la dependencia de la frecuencia en función del vector número de onda, es decir,

$$\omega_{\mathbf{k}} = \omega(\mathbf{k}) \quad (1.23)$$

Los ejemplos más comunes de las excitaciones elementales colectivas en sólidos son: fonones, magnones, plasmones, polarones y polaritones [Pines, 1963].

En los aislantes, por ejemplo, existen oscilaciones dipolares producidas por la vibración de los iones positivos y negativos en la red cristalina y éstas pueden interactuar con ondas electromagnéticas oscilantes. La cuantización de esta interacción se conoce como polaritón. Como las ondas electromagnéticas y las ondas de polarización generalmente oscilan armónicamente, la interacción entre estos dos sistemas puede explicarse en forma similar al caso clásico de dos péndulos acoplados, donde un nuevo modo de vibración se produce debido al acoplamiento de los dos sistemas armónicos, que para el caso de luz y ondas de polarización resulta una nueva relación de dispersión.

En un material ferromagnético a temperatura $T=0K$, todos los espines se encuentran totalmente paralelos. Sus primeros estados excitados consisten en deflectar la orientación de dichos espines con una infinitesimal desviación entre vecinos cercanos. El efecto colectivo coherente de estas deflexiones constituye una onda cuyos modos normales de oscilación se conocen como magnones. En la Figura 1.3 se puede observar una representación de esta onda de espines.

Dentro del estudio de excitaciones elementales, también es importante considerar la interacción entre éstas. Por ejemplo, para estudiar la conductividad eléctrica en un material el modelo de gas de electrones es insuficiente para explicar las propiedades de los sólidos, ya que este último predice conductividad eléctrica infinita [Haken, 1976]. En realidad, el movimiento de electrones se encuentra continuamente perturbado por la

presencia de impurezas y defectos estructurales, así como por las vibraciones de la red cristalina, provocando que dichos electrones desvíen su trayectoria, lo que resulta en la aparición de resistencia eléctrica finita en el sólido. En particular, la interacción entre un electrón y una onda de vibración atómica provoca un cambio en la masa del electrón, produciendo una cuasipartícula denominada polarón; a esta última se le atribuye las deformaciones provocadas en la red del sólido debido al movimiento de los electrones al pasar a través de la red como se muestra en la Figura 1.4. De hecho, un fuerte acoplamiento entre un electrón y las ondas vibracionales genera una alta resistencia eléctrica en el estado normal de conducción, sin embargo, este acoplamiento podría producir el fenómeno de superconductividad con una mayor temperatura crítica, como se verá en la sección 2.3.

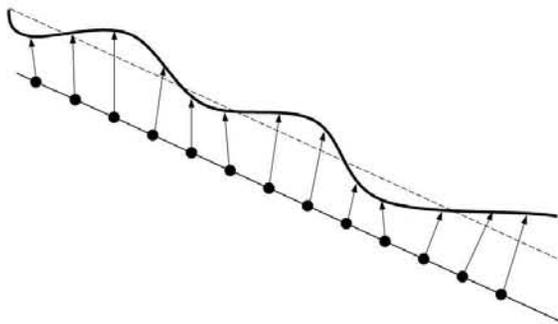


Figura 1.3. Representación de una onda de espín, magnón, que se propaga en un material ferromagnético. Se aprecia la desorientación de los momentos magnéticos.

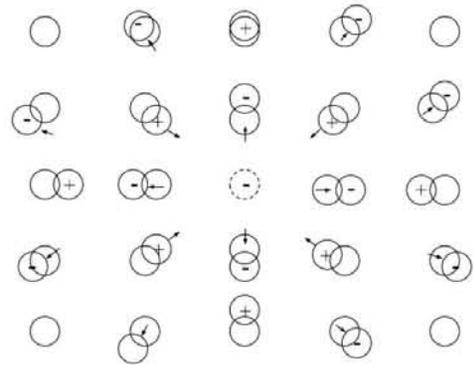


Figura 1.4. Esquema de un polarón. El electrón, representado por un círculo con líneas punteadas en el centro, desplaza los iones del cristal de sus posiciones de equilibrio.

Otra excitación elemental colectiva aparece al considerar la variación espacial de la densidad de electrones que se mueven con respecto a los iones positivos en un sólido, provocando que la distribución espacial de carga en el cristal no sea neutra localmente. A su vez, existen campos restitutivos que tienden a “jalar” a los electrones a su posición original, provocando que la densidad de carga de los electrones oscile y a ésta se le conoce como oscilación de plasma (gas ionizado). Sus modos normales de oscilación se les denominan plasmones.

En resumen, las excitaciones elementales son cuantos que permiten describir los primeros estados excitados de un sistema macroscópico y además puede introducirse en

su estudio nuevas excitaciones compuestas de varias cuasipartículas renormalizando la interacción entre ellas. Por ejemplo, el electrón y el hueco son cuasipartículas en sólidos ya que, en el caso del electrón, éste tiene una masa efectiva generalmente diferente de la del vacío. La interacción atractiva entre éstas dos genera una nueva excitación elemental llamada excitón. Además, dicho excitón puede combinarse con un fotón produciendo otra cuasipartícula conocida como excitón-polaritón. Recientemente se ha observado la condensación de Bose-Einstein de excitón-polaritón en microcavidades semiconductoras [Plumhof, 2014].

1.3. Aproximación de campo medio

Debido a que la física de los sólidos es un problema de muchos cuerpos y no se conoce hasta la fecha una solución general de dicho problema. Existen diversos métodos aproximados para enfrentar este problema con la finalidad de obtener el estado base y el espectro de energías del sistema. Por ejemplo, el método autoconsistente de Hartree-Fock que calcula la función de onda del problema de muchos cuerpos asumiendo que ésta es un solo determinante de Slater y en consecuencia da una solución aproximada a la ecuación de Schrödinger de muchas partículas. Otro método bastante utilizado en la física y química para el cálculo de las propiedades electrónicas de los materiales es el de DFT por sus siglas en inglés *Density Functional Theory* (Teoría de los Funcionales de la Densidad) que a partir de los teoremas de Hohenberg y Konh se expresa la energía electrónica total del sistema como un funcional de la densidad de un electrón, logrando hacer más eficientes los cálculos numéricos con funcionales de correlación e intercambio que surgen, frecuentemente, ajenos a la naturaleza del sistema [Atkins, 2005]. Los dos métodos antes mencionados reducen el problema de muchos cuerpos a un problema de una sola partícula sujeta a un campo promedio producido por las demás partículas. Este tipo de métodos se conocen como la aproximación de campo medio y un ejemplo de su formulación matemática se muestra a continuación.

Consideremos un sistema formado por dos tipos de partículas -descritas por los operadores \hat{a}_ν y \hat{b}_μ - que sólo interactúan entre partículas de diferente especie, cuyo hamiltoniano en segunda cuantización es

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V}_{int} = \sum_{\nu} \langle \nu | \hat{T}_a | \nu \rangle \hat{a}_\nu^\dagger \hat{a}_\nu + \sum_{\mu} \langle \mu | \hat{T}_b | \mu \rangle \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_\mu + \sum_{\nu, \mu, \nu', \mu'} \langle \nu, \mu | \hat{V} | \nu', \mu' \rangle \hat{a}_\nu^\dagger \hat{b}_\mu^\dagger \hat{b}_{\mu'} \hat{a}_{\nu'}, \quad (1.24)$$

donde $\hat{H}_o = \sum_{\nu} \langle \nu | \hat{T}_a | \nu \rangle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} + \sum_{\mu} \langle \mu | \hat{T}_b | \mu \rangle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu}$ y $\hat{V}_{int} = \sum_{\nu, \mu, \nu', \mu'} \langle \nu, \mu | \hat{V} | \nu', \mu' \rangle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \hat{a}_{\nu'}$.

Supongamos que los operadores de densidad $\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu}$ y $\hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu}$ son muy cercanos a sus valores promedio $\langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} \rangle$ y $\langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu} \rangle$ dados por

$$\begin{aligned} \bar{n}_{\nu\nu'}^a &= \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle = \frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}_{MF}} \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \right) \\ \bar{n}_{\mu\mu'}^b &= \langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \rangle = \frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}_{MF}} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \right), \end{aligned} \quad (1.25)$$

donde $Z_{MF} = \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}_{MF}} \right)$ es la función de partición del campo medio [Bruus, 2004]. En general, se define el promedio termodinámico de un operador como

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}_{MF}} \hat{A} \right) \quad (1.26)$$

y que además satisface

$$\langle \hat{A} \rangle^* = \frac{1}{Z_{MF}^*} \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}_{MF}^{\dagger}} \hat{A}^{\dagger} \right) = \frac{1}{Z_{MF}} \text{Tr} \left(e^{-\beta \hat{H}_{MF}} \hat{A}^{\dagger} \right) = \langle \hat{A}^{\dagger} \rangle. \quad (1.27)$$

Al definir los operadores de desviación $\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} - \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu} \rangle$ y $\hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu} - \langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu} \rangle$ y sustituir en \hat{V}_{int} de la ecuación (1.24), se obtiene

$$\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \hat{a}_{\nu'} = \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} = \left[\left(\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} - \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle \right) + \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle \right] \left[\left(\hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} - \langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \rangle \right) + \langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \rangle \right], \quad (1.28)$$

donde se utilizó $\left[\hat{a}_{\nu}^{\dagger}, \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \right] = 0$ ya que los operadores \hat{a}_{ν} y \hat{b}_{μ} son de diferente especie. Para el caso en que los operadores de desviación son pequeños respecto a su valor promedio, puede despreciarse el término $\left(\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} - \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle \right) \left(\hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} - \langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \rangle \right)$ y la ecuación (1.28) se reescribe como

$$\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \hat{a}_{\nu'} \simeq \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \rangle + \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} - \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle \langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \rangle. \quad (1.29)$$

De aquí se obtiene un hamiltoniano de campo medio (\hat{H}_{MF}) expresado mediante operadores de una sola partícula como

$$\hat{H}_{MF} = \hat{H}_o + \hat{V}_{MF}, \quad (1.30)$$

donde

$$\hat{V}_{MF} = \sum_{\nu, \mu, \nu', \mu'} \langle \nu, \mu | \hat{V} | \nu', \mu' \rangle \left(\hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \rangle + \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \right) - \sum_{\nu, \mu, \nu', \mu'} \langle \nu, \mu | \hat{V} | \nu', \mu' \rangle \langle \hat{a}_{\nu}^{\dagger} \hat{a}_{\nu'} \rangle \langle \hat{b}_{\mu}^{\dagger} \hat{b}_{\mu'} \rangle$$

es la interacción entre las partículas de distinta especie dentro de la aproximación de

campo medio. En resumen, se ha transformado el problema inicial de muchas partículas interactuantes a un problema de una sola partícula sujeta en un campo promedio de las demás partículas. De hecho, la fidelidad de la aproximación se verifica en tanto se cumplan que los operadores de desviación son casi nulos.

En general, dentro de la aproximación de campo medio el producto de dos operadores \hat{A} y \hat{B} puede escribirse como

$$\hat{A}\hat{B} \simeq \hat{A}\langle\hat{B}\rangle + \langle\hat{A}\rangle\hat{B} - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle. \quad (1.31)$$

Otro ejemplo surge al considerar un sistema de partículas idénticas, indistinguibles e interactuantes, donde el hamiltoniano (1.24) puede reescribirse como

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V}_{int} = \sum_v \langle v | \hat{T} | v \rangle \hat{c}_v^\dagger \hat{c}_v + \frac{1}{2} \sum_{v,\mu,v',\mu'} \langle v,\mu | \hat{V} | v',\mu' \rangle \hat{c}_v^\dagger \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_\mu \hat{c}_{v'}, \quad (1.32)$$

de forma que al aplicar la aproximación de campo medio a los operadores de densidad $\rho_{vv'} = \hat{c}_v^\dagger \hat{c}_{v'}$ y $\rho_{\mu\mu'} = \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'}$ el hamiltoniano (1.32) se transforma en

$$\hat{H} \simeq \sum_v \langle v | \hat{T} | v \rangle \hat{c}_v^\dagger \hat{c}_v + \frac{1}{2} \sum_{v,\mu,v',\mu'} \langle v,\mu | \hat{V} | v',\mu' \rangle \left(\hat{c}_v^\dagger \hat{c}_v \langle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \rangle + \langle \hat{c}_v^\dagger \hat{c}_{v'} \rangle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} - \langle \hat{c}_v^\dagger \hat{c}_{v'} \rangle \langle \hat{c}_\mu^\dagger \hat{c}_{\mu'} \rangle \right). \quad (1.33)$$

La aproximación de campo medio se utiliza frecuentemente en el estudio de transiciones de fase que involucra una ruptura de simetría. Cuando a una temperatura crítica el estado termodinámico del sistema desarrolla un valor esperado diferente de cero para alguna cantidad macroscópica que tiene simetría menor que el hamiltoniano original, se llama rompimiento espontáneo de simetría [Bruus, 2004]. La cantidad encargada de supervisar dicha transición de fase se conoce como el parámetro de orden. Algunos ejemplos de este fenómeno son la superconductividad y el ferromagnetismo, donde los parámetros de orden son respectivamente la brecha superconductora y la magnetización del sistema. En el siguiente capítulo se discutirá la superconductividad y la formación de pares electrónicos dentro del formalismo de la aproximación de campo medio de pares, que es una variación del campo medio de densidad electrónica presentado en este capítulo.

Capítulo 2

FORMACIÓN DE PARES

Uno de los fenómenos más fascinantes en la Física del Estado Sólido es la superconductividad. El modelo microscópico ampliamente aceptado para su entendimiento es la teoría propuesta por Jonh Bardeen, Leon Cooper y Robert Schrieffer (BCS) desarrollada en 1957. Dicha teoría se basa en los pares de Cooper que consisten en dos electrones interactuantes atractivamente mediante el intercambio de bosones, por ejemplo fonones virtuales.

En la primera sección de este capítulo se presenta la teoría desarrollada por Cooper mostrando que al colocar dos electrones extras con interacción atractiva sobre la superficie de Fermi, éstos forman un estado ligado con energía menor a la de Fermi. Dichos electrones fuertemente correlacionados hoy en día se conocen como pares de Cooper. El formalismo del campo medio -discutida en el capítulo uno- puede extenderse a pares de electrones, como se verá en la segunda sección. Asimismo, se presentará la teoría BCS para superconductores convencionales con brecha superconductora isotrópica y pares de Cooper con espín singulete, como se muestra en la Figura 2.1.

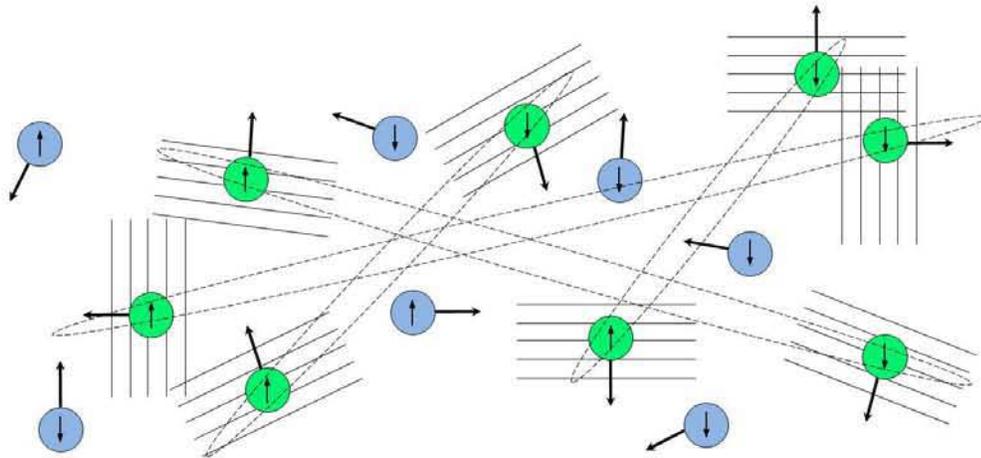


Figura 2.1. Esquema de la formación de pares de Cooper en el espacio real donde cada electrón se representa por un círculo con la flecha interna indicando la orientación de su espín y la flecha externa su momento lineal. Las líneas punteadas muestran la asociación entre dos electrones formando un estado singulete y las cinco líneas paralelas representan la onda plana asociada a cada electrón. Los círculos azules indican electrones no apareados.

2.1. Pares de Cooper

En el lenguaje de segunda cuantización, el hamiltoniano de un sistema multielectrónico puede escribirse como [Fetter, 2003]

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{p}, \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}, \quad (2.1)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es la energía de un electrón con momento lineal \mathbf{k} , $\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger}$ y $\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}$ representan respectivamente los operadores de creación y aniquilación de un electrón con momento \mathbf{k} y espín $\sigma = \uparrow$ ó \downarrow . Por ejemplo, para electrones libres se tiene que $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

En 1956, Leon Cooper encontró que una interacción neta atractiva entre los electrones conduce a la formación de pares de electrones, conocidos como pares de Cooper. El mostró que el mar de Fermi de electrones es inestable sin importar que tan débil sea la interacción, siempre y cuando sea atractiva. Para estudiar la formación del par electrónico, consideremos un gas de electrones a temperatura cero y un par de electrones adicionales colocado sobre la superficie de Fermi con momento total $\mathbf{K} = \mathbf{k} + \mathbf{p}$ igual a cero, ya que el estado base se espera con momento total cero. Entonces, con esta suposición el hamiltoniano (2.1) se reescribe como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow}, \quad (2.2)$$

donde se realizó un cambio de variables mudas primero entre $\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}'$ y luego entre $\mathbf{k}' + \mathbf{q} \leftrightarrow \mathbf{k}$. Asimismo, como el momento total $\mathbf{K} = \mathbf{k}' + \mathbf{p}$ es cero entonces $\mathbf{p} - \mathbf{q} = -\mathbf{k}' - \mathbf{q} = -\mathbf{k}$. El hamiltoniano (2.2) también se conoce con el nombre del hamiltoniano de BCS.

Además, debido al principio de exclusión de Pauli estos dos electrones no pueden ocupar estados cuya energía sea menor a la energía de Fermi ya que todos los niveles debajo de ésta se encuentran ocupados a temperatura cero, es decir, aquellos estados en los cuales $k < k_F$. De aquí que la función de onda del par se escribe como

$$|\psi\rangle = \sum_{k > k_F} g(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} |F\rangle, \quad (2.3)$$

donde $|F\rangle$ denota el estado cuántico con todos los estados electrónicos ocupados hasta la energía de Fermi y $g(\mathbf{k})$ es la amplitud de probabilidad de encontrar el par de

electrones en los estados \mathbf{k} y $-\mathbf{k}$ con espines \uparrow y \downarrow respectivamente. Además, la normalización de la función de onda requiere que

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{\mathbf{k}} |g(\mathbf{k})|^2 = 1. \quad (2.4)$$

Como los estados dentro de la esfera de Fermi ya se encuentran ocupados a temperatura cero, sucede que

$$g(\mathbf{k}) = 0 \quad k < k_F. \quad (2.5)$$

Suponiendo un potencial de interacción atractiva constante tal que

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V, & \text{si } \varepsilon_{\mathbf{k}}, \varepsilon_{\mathbf{k}'} \in (E_F, E_F + \hbar\omega_D) \\ 0, & \text{otros casos} \end{cases}, \quad (2.6)$$

donde ω_D es la frecuencia de Debye, que es la máxima frecuencia que puede tener un fonón dentro del modelo de Debye. Sustituyendo las expresiones anteriores en (2.2) resulta que

$$E = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = 2 \sum_{k > k_F} \varepsilon_{\mathbf{k}} |g(\mathbf{k})|^2 - V \sum_{k, k' > k_F} g^*(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}') \quad (2.7)$$

es la energía del par. Al expresar

$$E = E - \lambda \left(\sum_{k > k_F} g^*(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}) - 1 \right) \quad (2.8)$$

y aplicar el método variacional, derivando respecto a $g^*(\mathbf{k})$ para alguna \mathbf{k} e igualando a cero se tiene que

$$(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - \lambda) g(\mathbf{k}) = V \sum_{k' > k_F} g(\mathbf{k}'). \quad (2.9)$$

Multiplicando por $g^*(\mathbf{k})$, sumando sobre \mathbf{k} y utilizando la condición de normalización (2.4) obtenemos que

$$\lambda = 2 \sum_{k > k_F} \varepsilon_{\mathbf{k}} |g(\mathbf{k})|^2 - V \sum_{k, k' > k_F} g^*(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}') = E. \quad (2.10)$$

Finalmente, renombrando $\sum_{k' > k_F} g(\mathbf{k}') = G$ y sumando ambos lados de la ecuación (2.9)

sobre \mathbf{k} se llega a que

$$\frac{1}{V} = \sum_{k > k_F} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E}, \quad (2.11)$$

la cual determina la energía del par electrónico.

En el límite termodinámico puede remplazarse la suma por una integral sobre todos los estados posibles, es decir,

$$\frac{1}{V} = \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{D(\varepsilon)}{2\varepsilon - E} d\varepsilon \approx D(E_F) \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{1}{2\varepsilon - E} d\varepsilon = \frac{D(E_F)}{2} \ln \left[\frac{2(E_F + \hbar\omega_D) - E}{2E_F - E} \right], \quad (2.12)$$

donde $D(E_F)$ es la densidad de estados electrónicos evaluada en la energía de Fermi representada por $D(\varepsilon)$ pues es constante dentro del intervalo de integración ya que $\hbar\omega_D \ll E_F$ [Ramírez, 2012]. La ecuación (2.12) puede reescribirse, tomando en cuenta la aproximación de acoplamiento débil, es decir $VD(E_F) \ll 1$, como

$$E = 2E_F - \frac{2\hbar\omega_D}{e^{\frac{2}{VD(E_F)}} - 1} \approx 2E_F - 2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{VD(E_F)}}, \quad (2.13)$$

lo cual prueba que existe un estado ligado de dos electrones con energía menor a $2E_F$ debido a la interacción atractiva electrón-electrón. Por lo tanto, la energía del par de electrones es menor que cuando se encuentran en la superficie de Fermi sin aparearse.

El resultado anterior se obtuvo al considerar una interacción electrón-electrón atractiva en la ecuación (2.6), la cual puede surgir de la interacción electrón-ión en un sólido como veremos a continuación. El proceso de atracción puede visualizarse como sigue: un electrón polariza al medio atrayendo iones de carga positiva presentes en la red, en consecuencia estos iones atraen a su vez a otro electrón, resultando así un efecto neto atractivo entre pares de electrones.

En el lenguaje de cuasipartículas, la interacción atractiva electrón-electrón puede explicarse mediante un proceso en el que un electrón emite un fonón para ser absorbido después por otro electrón, como se muestra en el diagrama de Feynman de la Figura 2.2.

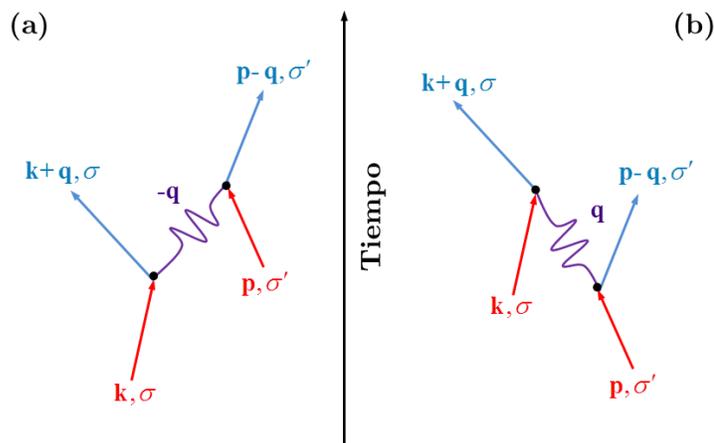


Figura 2.2. Diagrama de Feynman de la interacción electrón-electrón vía fonón con los mismos estados iniciales y finales. (a) Un electrón en el estado \mathbf{k} emite un fonón con vector de onda $-\mathbf{q}$, el cual es absorbido por un segundo electrón. (b) Un electrón en el estado \mathbf{p} emite un fonón con vector de onda \mathbf{q} que es absorbido por el otro electrón.

A continuación se presenta la deducción matemática de una interacción electrón-electrón atractiva mediante el intercambio de un fonón virtual, desarrollada por Herbert Fröhlich en 1950 [Fröhlich, 1950]. Partimos del término de interacción electrón-fonón del hamiltoniano de Fröhlich dado por

$$\hat{H}_{e-f} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} D_{\mathbf{q}} \hat{s}_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} + D_{\mathbf{q}}^* \hat{s}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (2.14)$$

donde $D_{\mathbf{q}}$ el coeficiente de la interacción electrón-fonón y $\hat{s}_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\hat{s}_{\mathbf{q}})$ es el operador de creación (aniquilación) de un fonón con vector de onda \mathbf{q} . Como se observa en la Figura 2.2, hay tres estados que participan en el proceso de interacción, a dichos estados los etiquetaremos como inicial $|i\rangle$, final $|f\rangle$ e intermedio $|m\rangle$. Los estados iniciales y finales para ambos casos, (a) y (b), son

$$|i\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{p}, \sigma'}^{\dagger} |0\rangle \quad (2.15)$$

$$|f\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \sigma'}^{\dagger} |0\rangle \quad (2.16)$$

y los estados intermedios correspondientes

$$\begin{aligned} |m^{(a)}\rangle &= \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{p}, \sigma'}^{\dagger} \hat{s}_{\mathbf{q}}^{\dagger} |0\rangle \\ |m^{(b)}\rangle &= \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, \sigma'}^{\dagger} \hat{s}_{\mathbf{q}}^{\dagger} |0\rangle \end{aligned}, \quad (2.17)$$

donde las etiquetas (a) y (b) corresponden a los casos expuestos en la Figura 2.2. Además, se sigue que

$$\langle m^{(a)} | \hat{H}_{e-f} | i \rangle = \langle m^{(b)} | \hat{H}_{e-f} | i \rangle = D_{\mathbf{q}} \quad (2.18)$$

y

$$\langle f | \hat{H}_{e-f} | m^{(a)} \rangle = \langle f | \hat{H}_{e-f} | m^{(b)} \rangle = D_{\mathbf{q}}^*. \quad (2.19)$$

Por otro lado, las energías de cada estado son

$$E_i = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{p}} \quad (2.20)$$

para el estado inicial y

$$E_f = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} \quad (2.21)$$

para el estado final. Finalmente para los estados intermedios

$$\begin{aligned} E_m^{(a)} &= \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{p}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}} \\ E_m^{(b)} &= \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}} \end{aligned}, \quad (2.22)$$

donde $\omega_{\mathbf{q}}$ es la frecuencia de vibración del fonón. Resolviendo por medio de la teoría perturbativa a segundo orden, la amplitud de transición del estado inicial al final es [Navarro, 2007]

$$\langle f | \hat{H}_{e-f} | i \rangle = \sum_m \langle f | \hat{H}_{e-f} | m \rangle \frac{1}{2} \left(\frac{1}{E_f - E_m} + \frac{1}{E_i - E_m} \right) \langle m | \hat{H}_{e-f} | i \rangle \quad (2.23)$$

donde la suma se realiza sobre todos los estados intermedios m . Sustituyendo las relaciones (2.18) a (2.22) resulta que la energía de transición se escribe como

$$\langle f | \hat{H}_{e-f} | i \rangle = D_{\mathbf{q}}^2 \hbar \omega_{\mathbf{q}} \left(\frac{1}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 - (\hbar \omega_{\mathbf{q}})^2} + \frac{1}{(\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}})^2 - (\hbar \omega_{\mathbf{q}})^2} \right). \quad (2.24)$$

Notemos que si

$$|\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}| < \hbar \omega_{\mathbf{q}} \quad \text{y} \quad |\varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}| < \hbar \omega_{\mathbf{q}}, \quad (2.25)$$

entonces la interacción es de carácter atractiva y además contrarresta la interacción repulsiva debida a la fuerza de Coulomb. La máxima energía que puede tener un fonón es $\hbar \omega_D$ dentro del modelo de Debye. Entonces, para que haya una interacción atractiva electrón-electrón vía fonón se requiere $|\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}| < \hbar \omega_D$, la cual conduce a una franja debajo de la superficie de Fermi de espesor $\hbar \omega_D$, como se muestra en la Figura 2.3. Nótese que el proceso de absorción de un fonón por un electrón con energía $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ requiere que el estado con energía $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ se encuentre desocupado. A temperatura cero, dicho proceso sólo puede suceder en una franja de espesor $\hbar \omega_D$ alrededor de la superficie de Fermi.

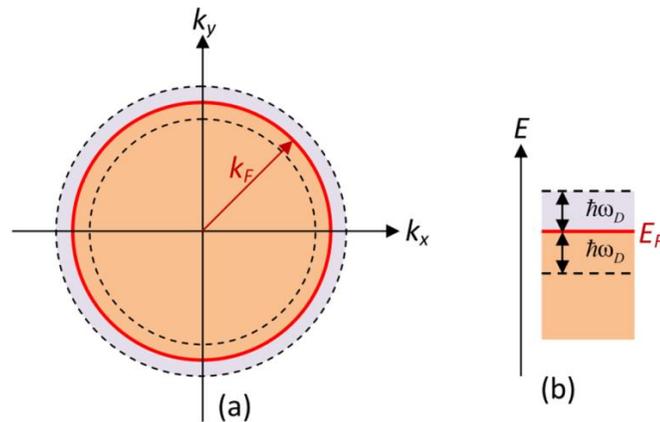


Figura 2.3. (a) Estados electrónicos en el espacio recíproco ocupados a temperatura cero hasta la superficie de Fermi (línea sólida) en el modelo de electrones libres y (b) estados apareables en la representación de la energía [Ramírez, 2012].

2.2. Campo medio de pares

Una interacción atractiva del tipo (2.6) junto con el hamiltoniano (2.1) proporcionan el modelo más simple de la interacción electrón-electrón en un sólido para analizar la formación de los pares de Cooper, los cuales pueden representarse mediante los operadores de creación y aniquilación dados por

$$\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \quad \text{y} \quad \hat{b}_{\mathbf{k}} = \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}, \quad (2.26)$$

los cuales están formados por un electrón con momento \mathbf{k} y espín hacia arriba y un segundo electrón con momento $-\mathbf{k}$ y espín hacia abajo. Para dar solución a este tipo de hamiltonianos comúnmente se utiliza la aproximación de campo medio. Sin embargo, a diferencia del capítulo anterior, ahora el promedio se realiza sobre los operadores de pares. De forma que la correlación a despreciar es sobre las interacciones entre los pares electrónicos, es decir, que ahora los pares de electrones se consideran como una sola partícula. Dentro del formalismo de campo medio discutido en la sección 1.3, se tienen

$$\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} = \langle \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle + \left(\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} - \langle \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle \right) \quad (2.27)$$

y

$$\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} = \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \rangle + \left(\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} - \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \rangle \right), \quad (2.28)$$

entonces,

$$\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} \approx \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} \rangle + \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \rangle \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} - \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \rangle \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} \rangle. \quad (2.29)$$

Sustituyendo esta última relación en el hamiltoniano (2.1) resulta que

$$\hat{H}_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} - \sum_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'}^* \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \rangle \langle \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle, \quad (2.30)$$

donde

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} \rangle \quad (2.31)$$

y $\Delta_{\mathbf{k}'}^* = - \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \rangle = - \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle^*$ debido a (1.27). La cantidad $\Delta_{\mathbf{k}}$ se denomina brecha superconductor como veremos en la siguiente sección. Notemos también que $\Delta_{\mathbf{k}'} = \Delta_{\mathbf{k}}$ pues \mathbf{k} y \mathbf{k}' son variables mudas y recorren todos los estados accesibles. El hamiltoniano (2.30) será el punto de partida para analizar la superconductividad en la siguiente sección.

2.3. Teoría BCS de la superconductividad

La superconductividad fue descubierta por Kamerlingh Onnes en 1911 al enfriar mercurio a una temperatura por debajo de 4.2K. En 1933, Walter Meissner y Robert Ochsenfeld observaron que los metales en el estado superconductor se comportan como diamagnetos perfectos, es decir, expulsan por completo los campos magnéticos de su interior. Fritz y Heinz London, en 1935, desarrollaron un modelo fenomenológico capaz de reproducir el efecto Meissner. En 1950, Herbert Fröhlich enfatizó la importancia de las vibraciones de red en la superconductividad mediante la interacción electrón-fonón. Finalmente, en 1957 J. Bardeen, L. Cooper y J. Schrieffer (BCS) propusieron un modelo que explica a nivel microscópico los fenómenos que ocurren dentro de los metales a bajas temperaturas relacionados con la superconductividad [Bardeen, 1957]. A continuación se presenta un resumen de la teoría BCS.

El hamiltoniano (2.1) contiene información necesaria para estudiar el fenómeno de superconductividad a través de la brecha superconductora y la función de onda del estado base superconductor. Sin embargo, al reescribir el hamiltoniano (2.1) en la aproximación de campo medio se observa en (2.30) que el número de partículas no se conserva. De aquí la necesidad de trabajar con el ensamble gran canónico partiendo del hamiltoniano

$$\hat{H} - \mu \hat{N}, \quad (2.32)$$

donde μ es el potencial químico que a temperatura cero coincide con la energía de Fermi del sistema [Pathria, 2011] y $\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ el operador de número de electrones. Por lo que el hamiltoniano de BCS en la aproximación de campo medio para pares se reescribe como

$$\hat{H}_{MF} - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger - \sum_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} \rangle, \quad (2.33)$$

donde $\epsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. Dicho hamiltoniano puede diagonalizarse mediante una transformación unitaria sobre los operadores fermiónicos, de forma que en este nuevo espacio los operadores sean de creación ($\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger$) y aniquilación ($\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}$) de bogolones. Bogoliubov [Bogoliubov, 1958] y Valantin [Valantin, 1958] mostraron independientemente que la transformación apropiada es

$$\begin{aligned}\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow} &= u_{\mathbf{k}}\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} - v_{\mathbf{k}}\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \\ \hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger &= v_{\mathbf{k}}\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} + u_{\mathbf{k}}\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger\end{aligned}, \quad (2.34)$$

donde $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ son coeficientes reales que satisfacen

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (2.35)$$

Los nuevos operadores $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}}$ pueden interpretarse como excitaciones elementales del sistema que satisfacen las reglas de anticonmutación de los fermiones, como se muestra a continuación.

$$\begin{aligned}\{\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}, \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}\} &= v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger\} + v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}\} + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger\} + u_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}\} = 0, \\ \{\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{\gamma}_{\mathbf{k}',\uparrow}\} &= u_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}\} - u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\} - v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}\} + v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\} = 0, \\ \{\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}\} &= u_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}\} + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger\} - v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}\} - v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger\} = 0, \\ \{\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \hat{\gamma}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger\} &= \{\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{\gamma}_{\mathbf{k}',\uparrow}\}^\dagger = 0, \quad \{\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\} = \{\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}, \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}\}^\dagger = 0, \quad \{\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\} = \{\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}\}^\dagger = 0, \\ \{\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\} &= u_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\} + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}\} - v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\} - v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}\} = 0, \\ \{\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}, \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\} &= v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}\} + v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\} + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}\} + u_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \\ \{\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{\gamma}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger\} &= u_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger\} - u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}\} - v_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger\} + v_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}'}\{\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'},\end{aligned} \quad (2.36)$$

donde se utilizaron las reglas de anticonmutación fermiónicas (1.16). Además, se tiene que la transformación inversa es

$$\begin{aligned}\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} &= u_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow} + v_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \\ \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger &= -v_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow} + u_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger.\end{aligned} \quad (2.37)$$

De (2.37) se sigue que

$$\begin{aligned}\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} + \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} &= 2v_{\mathbf{k}}^2 + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2)(\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow} + \hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}) + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\left[\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger\right] + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\left[\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}, \hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}\right] \\ \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}(\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow} + \hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}) + u_{\mathbf{k}}^2\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^2\hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} &= u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} - u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'}(\hat{\gamma}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger\hat{\gamma}_{\mathbf{k}',\uparrow} + \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}) + u_{\mathbf{k}'}^2\hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}\hat{\gamma}_{\mathbf{k}',\uparrow} - v_{\mathbf{k}'}^2\hat{\gamma}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger\hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger.\end{aligned} \quad (2.38)$$

Entonces, el hamiltoniano (2.33) se reescribe en términos de la nueva base como

$$\hat{H}_{\text{MF}} - \mu\hat{N} = E_0 + \hat{H}_d + \hat{H}_{nd}, \quad (2.39)$$

donde

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}} (2\epsilon_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^2 + 2\Delta_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} \rangle \quad (2.40)$$

es el término constante,

$$\hat{H}_d = \sum_{\mathbf{k}} \left[\epsilon_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) + 2\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \right] (\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow} + \hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}) \quad (2.41)$$

es el término diagonal del hamiltoniano basado en los operadores de número de los bogolones y finalmente

$$\hat{H}_{nd} = \sum_{\mathbf{k}} \left[2\epsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \right] (\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger + \hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}) \quad (2.42)$$

es el término no diagonal del hamiltoniano. Dado que el propósito de la transformación (2.34) es diagonalizar el hamiltoniano (2.33), el término no diagonal \hat{H}_{nd} debe ser cero.

En otras palabras,

$$2\epsilon_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) = 0. \quad (2.43)$$

Por otro lado, la cantidad física definida en (2.31) puede reescribirse como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow} \rangle = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \left(1 - \langle \hat{\gamma}_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}',\uparrow} \rangle - \langle \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \rangle \right). \quad (2.44)$$

Como los operadores de Bogoliubov satisfacen las reglas de anticonmutación de los fermiones, el promedio de ocupación de los estados está determinado por la distribución de Fermi-Dirac

$$f(E_{\mathbf{k}}) = \langle \hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle = \langle \hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1}, \quad (2.45)$$

donde $\beta^{-1} = k_B T$, k_B la constante de Boltzmann y T la temperatura a la que se encuentra el sistema. Dada la relación (2.35), se puede introducir un único parámetro $\theta_{\mathbf{k}}$ tal que

$$\begin{cases} u_{\mathbf{k}} = \cos \theta_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}} \end{cases}. \quad (2.46)$$

Sustituyendo (2.46) en la ecuación (2.43) resulta que

$$\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}} = \frac{\sin 2\theta_{\mathbf{k}}}{\cos 2\theta_{\mathbf{k}}} = \tan 2\theta_{\mathbf{k}}, \quad (2.47)$$

lo cual implica que

$$\begin{cases} \sin 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \\ \cos 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \end{cases} \quad (2.48)$$

donde $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$. Por lo tanto, los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ pueden reescribirse como

$$\begin{cases} u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)} \\ v_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right)} \end{cases}. \quad (2.49)$$

Además, éstos satisfacen las siguientes relaciones

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} \quad \text{y} \quad u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}, \quad (2.50)$$

de forma que la parte diagonal \hat{H}_d del hamiltoniano se reescribe como

$$\epsilon_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) + 2\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}. \quad (2.51)$$

Por lo tanto, $E_{\mathbf{k}}$ representa la energía asociada a la creación o aniquilación de bogolones, conocida también como energía de las excitaciones. Finalmente, sustituyendo la ecuación (2.50) en (2.44)

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2}} [1 - 2f(E_{\mathbf{k}'})] = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2}} \tanh \beta E_{\mathbf{k}'}, \quad (2.52)$$

donde la distribución de Fermi-Dirac se encuentra en términos de $E_{\mathbf{k}}$ ya que son los estados accesibles a los bogolones. Entonces, (2.52) se reescribe como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2}} \tanh \left(\frac{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2}}{2k_B T} \right). \quad (2.53)$$

De acuerdo con la teoría de BCS, se puede obtener soluciones analíticas suponiendo

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V, & \text{si } |\epsilon_{\mathbf{k}'}| < \hbar\omega_D, \\ 0, & \text{otros casos} \end{cases}, \quad (2.54)$$

y la densidad de estados constante $D(0)$ en el intervalo $(-\hbar\omega_D, \hbar\omega_D)$. Como podemos observar en la ecuación (2.53), si $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ no depende de \mathbf{k} , se puede factorizar $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ de la sumatoria y entonces ésta no dependerá de \mathbf{k} , por lo que $\Delta_{\mathbf{k}}$ tampoco dependerá de \mathbf{k} y la denotaremos por Δ . Además, en el límite termodinámico la ecuación (2.53) se reescribe como

$$1 = \frac{1}{2} V \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{D(\epsilon) d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + [\Delta(T)]^2}} \tanh \frac{\sqrt{\epsilon^2 + [\Delta(T)]^2}}{2k_B T} \approx \frac{1}{2} V D(0) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + [\Delta(T)]^2}} \tanh \frac{\sqrt{\epsilon^2 + [\Delta(T)]^2}}{2k_B T} \quad (2.55)$$

que es la ecuación para determinar $\Delta(T)$ conocida como brecha superconductor, debido a que $2\Delta(T)$ es la mínima energía requerida para tener dos bogolones en un estado excitado como se puede apreciar en $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + [\Delta(T)]^2}$. Para el caso de temperatura cero la ecuación (2.55) se reescribe como

$$1 = \frac{1}{2}VD(0) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\sqrt{\epsilon^2 + [\Delta(0)]^2}} d\epsilon, \quad (2.56)$$

es decir,

$$\Delta(0) = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh\left(\frac{1}{VD(0)}\right)} \approx 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{VD(0)}}, \quad (2.57)$$

para el límite de interacción débil $VD(0) \ll 1$.

Por otro lado, existe una temperatura donde ocurre la transición superconductor sin campo magnético ni corriente eléctrica. Ésta se conoce como la temperatura crítica superconductor (T_c), la cual se puede determinar reescribiendo la ecuación (2.55) para $\Delta(T_c) = 0$ como

$$1 = \frac{1}{2}VD(0) \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T_c}\right) d\epsilon \quad (2.58)$$

cuya solución es [Tinkham, 2004]

$$k_B T_c \approx 1.13 \hbar\omega_D e^{-\frac{1}{VD(0)}}. \quad (2.59)$$

Dada (2.57), la ecuación (2.59) se reescribe como

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} \approx 3.53, \quad (2.60)$$

la cual es una relación universal que predice la teoría BCS que coincide razonablemente bien con respecto a los resultados experimentales obtenidos para superconductores convencionales.

La parte central de la teoría propuesta por Bardeen, Cooper y Schrieffer, fue la función de onda del estado base superconductor que es [Bardeen, 1957]

$$|\psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger) |0\rangle, \quad (2.61)$$

donde se puede observar que los coeficientes $v_{\mathbf{k}}^2$ y $u_{\mathbf{k}}^2$ representan la probabilidad de encontrar o no un par de Cooper en el estado \mathbf{k} . Nótese que dichos coeficientes son los mismos que aparecen en la transformación de Bogoliubov-Valantin [Navarro, 2007]. Es importante mencionar que puede obtenerse la ecuación de la brecha superconductora (2.53) a temperatura 0 K mediante el método variacional, utilizando como función de prueba la función de onda de BCS (2.61) [Tinkham, 2004].

En resumen, dos hechos son cruciales para los superconductores: (1) La interacción electrón-electrón vía fonón es atractiva para energías $\epsilon_{\mathbf{k}}$ cerca de la superficie de Fermi y (2) dicha interacción atractiva ocasiona que la superficie de Fermi sea inestable ante la formación de pares de Cooper, provocando un colapso de dicha superficie que tiene como consecuencia la aparición de la brecha superconductora.

Capítulo 3.

MULTIPARES CORRELACIONADOS

En el capítulo dos, se presentó la solución analítica del hamiltoniano de BCS dentro de la aproximación de campo medio. Sin embargo, en 1963, R. W. Richardson obtuvo una solución analítica del hamiltoniano de muchos pares con interacción constante [Richardson, 1963], mapeando el problema de N ecuaciones diferenciales a un conjunto de N ecuaciones algebraicas no lineales acopladas. De forma que el estudio del fenómeno de la superconductividad puede ser descrito sin tener que recurrir a aproximaciones como lo es el campo medio.

En la primera sección de este capítulo se hace una revisión de la solución de Richardson, iniciando con los casos de uno y dos pares. Una vez establecida la metodología para obtener la solución, se generaliza al caso de N pares electrónicos interactuantes. En general, las soluciones numéricas de las ecuaciones algebraicas de Richardson son altamente inestables [Richardson, 1966], por lo que en la segunda sección del capítulo se analizan primeramente resultados analíticos de la energía total para el caso de dos pares, así como para un sistema de muchos pares cuando se encuentran en el estado base. Finalmente, en la última sección del capítulo se presentan los resultados numéricos que muestran el comportamiento de la energía total de multipares electrónicos.

3.1. Ecuaciones de Richardson

El hamiltoniano de pares introducido en (2.2) fue

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}', \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}', \uparrow}, \quad (3.1)$$

donde $V \geq 0$. Definiendo los operadores de pares de electrones como (2.26) dados por

$$\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} \quad \text{y} \quad \hat{b}_{\mathbf{k}} = \hat{c}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}, \uparrow}, \quad (3.2)$$

el hamiltoniano (3.1) puede reescribirse como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}'}. \quad (3.3)$$

Cabe mencionar que los operadores de pares satisfacen las siguientes reglas de conmutación

$$\left[\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \right] = \left[\hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}, \hat{c}_{\uparrow,\mathbf{k}}, \hat{c}_{\uparrow,\mathbf{k}}, \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (1 - \hat{n}_{\mathbf{k},\uparrow} - \hat{n}_{-\mathbf{k},\downarrow}) \text{ y } \left[\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'} \right] = \left[\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \right] = 0, \quad (3.4)$$

donde $\hat{n}_\alpha = \hat{c}_\alpha^\dagger \hat{c}_\alpha$ es la densidad electrónica en el estado α . Por lo tanto, los pares de Cooper no son bosones, a pesar de que su espín es cero. Además se tiene

$$\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger = 0 \quad (3.5)$$

que prohíbe colocar dos pares de electrones en el mismo estado cuántico, haciendo imposible una condensación de Bose-Einstein (BEC) de estos pares. Cabe mencionar que las combinaciones lineales de pares de Cooper sí tienen naturaleza bosónica en el límite diluido y presentan BEC [Ramírez, 2014].

Una propiedad importante que presenta el hamiltoniano (3.3) es el “bloqueo” de niveles por electrones no pareados de manera que la formación de los pares de Cooper queda restringida a aquellos niveles que se encuentran vacíos. Por lo tanto, si hay M niveles pareables y N pares de electrones, podemos restringir nuestra atención al espacio de Hilbert \mathbf{H}_U de las configuraciones cuya dimensión es igual a

$$U = \frac{M!}{N!(M-N)!} \quad (3.6)$$

y en este nuevo espacio el hamiltoniano de BCS se reduce a [Sierra, 2004]

$$\hat{H}_U = \sum_{\mathbf{k}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} - V \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}, \quad (3.7)$$

el cual contiene únicamente operadores de pares electrónicos y se ha considerado de (3.3) que

$$\sum_{\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} = \hat{n}_{\mathbf{k},\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k},\downarrow} = 2\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}. \quad (3.8)$$

Por lo tanto, la regla de conmutación (3.4) en el espacio reducido de Hilbert \mathbf{H}_U se reescribe como [Delft, 2000]

$$\left[\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \right] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (1 - 2\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}). \quad (3.9)$$

• Solución de Richardson para un solo par de Cooper

Consideremos el problema de Cooper en el cual se coloca un par de electrones sobre la superficie de Fermi, cuya función de onda puede escribirse como

$$|\psi_1\rangle = \sum_{\mathbf{k}''} g(\mathbf{k}'') \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger |0\rangle. \quad (3.10)$$

Sustituyendo (3.10) en la ecuación de Schrödinger correspondiente al hamiltoniano (3.7) con eigenvalor E_1 y utilizando las reglas de conmutación (3.4) se obtiene que

$$\begin{aligned} (\hat{H}_U - E_1)|\psi_1\rangle &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}''} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}'') \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger |0\rangle - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''} g(\mathbf{k}'') \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger |0\rangle - \sum_{\mathbf{k}''} E_1 g(\mathbf{k}'') \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}''} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}'') \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}''} - 2\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}''} \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}) |0\rangle \\ &\quad - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}''} g(\mathbf{k}'') \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger (\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} - 2\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}''} \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} + \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}) |0\rangle - \sum_{\mathbf{k}''} E_1 g(\mathbf{k}'') \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger |0\rangle \quad . \quad (3.11) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} (2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_1) g(\mathbf{k}) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left[(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_1) g(\mathbf{k}) - V \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') \right] \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle = 0 \end{aligned}$$

Por la independencia lineal de los estados $\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle$ resulta

$$g(\mathbf{k}) = \frac{V \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}')}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_1} \quad (3.12)$$

y sumando de ambos lados por \mathbf{k} se tiene que

$$\frac{1}{V} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_1} = 0, \quad (3.13)$$

donde la suma se extiende sobre todos los niveles arriba de la energía de Fermi para que la interacción electrón-fonón sea atractiva, como vimos en sección 2.1. La ecuación (3.13) se conoce como la solución de Richardson para un solo par y nos da información sobre la relación entre la energía del par E_1 , la energía de un solo electrón $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ y la interacción electrón-electrón V . Entonces, lo que se ha logrado es transformar el problema original de resolver la ecuación de Schrödinger a un problema algebraico de una ecuación no lineal cuya incógnita es la energía total E_1 . Cabe mencionar que la ecuación (3.13) coincide con (2.11) obtenida al resolver el problema de Cooper, partiendo de hamiltonianos diferentes. En la Física del Estado Sólido, la suma en la ecuación (3.13) se convierte a una integral en el límite termodinámico, obteniendo

$$E_1 = -\frac{2\hbar\omega_D}{2 - e^{\frac{VD(E_F)}{2}} - 1}. \quad (3.14)$$

Finalmente, sustituyendo (3.12) en (3.10) la función de onda del par es

$$|\psi_1\rangle = VG \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_1} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle = \left[\sum_{\mathbf{k}} (2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_1)^{-2} \right]^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_1} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle, \quad (3.15)$$

donde $G = \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}')$ y dado que la normalización de la función de onda es

$$1 = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \frac{V^2 G^2}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - E_1)(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_1)} \langle 0 | \hat{b}_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger | 0 \rangle = V^2 G^2 \sum_{\mathbf{k}} (2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_1)^{-2}, \quad (3.16)$$

utilizando las relaciones de conmutación (3.4).

• Solución de Richardson para dos pares de Cooper

Ahora, se colocan dos pares de Cooper sobre la superficie de Fermi cuya función de onda está dada por

$$|\psi_2\rangle = \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle, \quad (3.17)$$

con $g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ la amplitud de probabilidad de encontrar al primer par en el estado \mathbf{k}_1 y al segundo par en el estado \mathbf{k}_2 . Notemos que si $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$ la función de onda es cero por (3.5). Luego, la ecuación de Schrödinger que resulta para la función de onda (3.17) es

$$\hat{H}_U |\psi_2\rangle = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle - V \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle = E_2 |\psi_2\rangle. \quad (3.18)$$

El primer término de la ecuación (3.18) se puede reescribir como

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} - 2\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger) \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle \\ & = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) (\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger - 2\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger) |0\rangle \\ & = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) [\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_2} - \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_2} \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger)] |0\rangle \\ & = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) [\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1} \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_2}] |0\rangle \\ & = \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} (2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} + 2\varepsilon_{\mathbf{k}_2}) g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Análogamente, el segundo término de la ecuación (3.18) se reescribe como

$$\begin{aligned}
V \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle &= V \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \left(\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}_1} - 2\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}_1} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} + \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} \right) \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle \\
&= V \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_1 \neq \mathbf{k}_2}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) [\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}_1} \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger (\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}_2} - 2\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}_2} \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} + \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'})] |0\rangle \\
&= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left[V \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_2} g(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) + V \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_1} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) \right] \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle,
\end{aligned} \tag{3.20}$$

donde en la última igualdad se realizó un cambio de variables mudas entre $\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}_1$ para el primer término y $\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}_2$ para el segundo. Por lo tanto, sustituyendo (3.19) y (3.20) en el hamiltoniano (3.18), éste queda reescrito como

$$(\hat{H}_U - E_2) |\psi_2\rangle = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left[(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} + 2\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - E_2) g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) - V \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_1} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) - V \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_2} g(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) \right] \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle = 0. \tag{3.21}$$

Análogamente al caso de un solo par de Cooper, los estados $\hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle$ son linealmente independientes, entonces se tiene que

$$(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} + 2\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - E_2) g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) - V \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_1} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) - V \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_2} g(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) = 0. \tag{3.22}$$

Extendiendo la solución de un solo par de Cooper, Richardson consideró la energía como suma de dos parámetros R_1 y R_2 [Richardson, 1963] de forma que

$$E_2 = R_1 + R_2 \tag{3.23}$$

y además, propuso que la amplitud de probabilidad puede escribirse en términos de una función simetrizada que preserva la forma de la ecuación (3.12) extendida al caso de dos pares, es decir

$$g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_1)(2\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - R_2)} + \frac{1}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_2)(2\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - R_1)}. \tag{3.24}$$

Sustituyendo (3.24) en la ecuación (3.22) resulta que

$$\frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_1} + \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_2} - V \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_1} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) + \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - R_1} + \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - R_2} - V \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_2} g(\mathbf{k}, \mathbf{k}_2) = 0. \tag{3.25}$$

Igualando a cero los tres primeros términos que dependen de \mathbf{k}_1 en (3.25), se obtiene sin pérdida de generalidad que

$$\frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_1} + \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_2} - V \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}_1} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) = \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_1} + \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_2} - V \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}) + V g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1) = 0. \tag{3.26}$$

Finalmente, sustituyendo (3.24) en (3.26) y agrupando términos, resulta que

$$\frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_1} \left(1 - V \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_2} + \frac{2V}{R_1 - R_2} \right) + \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_2} \left(1 - V \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_1} + \frac{2V}{R_2 - R_1} \right) = 0, \quad (3.27)$$

donde se utilizó que

$$\frac{1}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_1)(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_2)} = \frac{1}{R_2 - R_1} \left(\frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_1} - \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_2} \right). \quad (3.28)$$

La ecuación (3.27) puede reescribirse como

$$\left(1 - V \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_2} + \frac{2V}{R_1 - R_2} \right) = -\frac{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_2} \left(1 - V \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_1} + \frac{2V}{R_2 - R_1} \right). \quad (3.29)$$

La ecuación (3.29) es igual a una constante, ya que su lado izquierdo no depende de \mathbf{k}_1 . Entonces, el lado derecho de (3.29) es también una constante y su factor entre paréntesis debe ser cero, pues $(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_1)/(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_2)$ depende de \mathbf{k}_1 . Por lo tanto [Pogosov, 2011]

$$\begin{cases} \frac{1}{V} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_1} + \frac{2}{R_2 - R_1} = 0 \\ \frac{1}{V} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_2} + \frac{2}{R_1 - R_2} = 0 \end{cases}. \quad (3.30)$$

Estas dos ecuaciones se conocen como las ecuaciones de Richardson para dos pares. De nueva cuenta lo que se ha logrado es transformar el problema de resolver la ecuación de Schrödinger, al problema de resolver un conjunto de dos ecuaciones no lineales acopladas, cuya función de onda es

$$|\psi_2\rangle = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left\{ \frac{1}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_1)(2\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - R_2)} + \frac{1}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - R_2)(2\varepsilon_{\mathbf{k}_2} - R_1)} \right\} \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2}^\dagger |0\rangle. \quad (3.31)$$

• Solución de Richardson para N pares de Cooper

Análogamente al caso de uno y dos pares de Cooper, podemos generalizar la solución de Richardson para el caso de N pares de electrones de la siguiente manera. Si proponemos la función de onda de N pares como [Richardson, 1964]

$$|\psi_N\rangle = \prod_{j=1}^N \hat{B}_j |0\rangle, \quad (3.32)$$

con

$$\hat{B}_j^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_j}, \quad (3.33)$$

donde R_j es el parámetro correspondiente al j -ésimo par. La suma de dichos parámetros, se demostrará a continuación, es la energía del sistema de N pares, es decir,

$$E_N = \sum_{j=1}^N R_j. \quad (3.34)$$

El operador \hat{B}_j^\dagger definido en (3.33) se denomina operador de pares colectivos de Richardson [Dukelsky, 2012]. Reescribiendo las ecuaciones (3.32) y (3.33) se tiene

$$|\psi_N\rangle = \prod_{j=1}^N \left(\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_j} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \right) |0\rangle = \sum_{\mathbf{k}_1} \cdots \sum_{\mathbf{k}_N} g(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N) \hat{b}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \cdots \hat{b}_{\mathbf{k}_N}^\dagger |0\rangle \quad (3.35)$$

donde la amplitud de probabilidad $g(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N) = \sum_{l_1}^N \cdots \sum_{l_N}^N \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_{l_1}} - R_1} \cdots \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}_{l_N}} - R_N}$ con $l_i \neq \{l_{i+1}, \dots, l_N\}$. En el apéndice A se deducen las propiedades de conmutación de los operadores de pares colectivos utilizadas a continuación.

Sustituyendo la función de onda (3.32) en la ecuación de Schrödinger tenemos que

$$\hat{H}|\psi_N\rangle = \sum_{\mathbf{k}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} \prod_{j=1}^N \hat{B}_j^\dagger |0\rangle - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} \prod_{j=1}^N \hat{B}_j^\dagger |0\rangle = E_N \prod_{j=1}^N \hat{B}_j^\dagger |0\rangle. \quad (3.36)$$

Para encontrar la solución de la ecuación (3.36), podemos utilizar las reglas de conmutación (A.5) y (A.7) para reescribir (3.36) como

$$\hat{H}_U |\psi_N\rangle = \sum_{i=1}^N \left\{ \prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger [\hat{H}_U, \hat{B}_i^\dagger] \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right\} |0\rangle + \prod_{i=1}^N \hat{B}_i^\dagger \hat{H}_U |0\rangle, \quad (3.37)$$

pero $\hat{H}_U |0\rangle = \sum_{\mathbf{k}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} |0\rangle - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} |0\rangle = 0|0\rangle$, por lo tanto (3.37) conduce a

$$\hat{H}_U |\psi_N\rangle = \sum_{i=1}^N \left\{ \prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger [\hat{H}_U, \hat{B}_i^\dagger] \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right\} |0\rangle. \quad (3.38)$$

Sustituyendo (A.9) en (3.38) obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{H}_U |\psi_N\rangle &= \sum_{i=1}^N R_i \prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger \hat{B}_i^\dagger \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger |0\rangle + \sum_{i=1}^N \left\{ \prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \left(1 - V \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_i} \right) \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right\} |0\rangle \\ &\quad + \sum_{i=1}^N \left\{ \prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{2V \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_i} \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right\} |0\rangle \end{aligned} \quad (3.39)$$

pero $\prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger \hat{B}_i^\dagger \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger = \prod_{l=1}^N \hat{B}_l^\dagger$. Además, el término entre paréntesis de la suma no depende de \mathbf{k} ni de l , entonces

$$\begin{aligned} \hat{H}_U |\psi_N\rangle = & \sum_{i=1}^N R_i |\psi_N\rangle + \sum_{i=1}^N \left(1 - V \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_i} \right) \left(\prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right) |0\rangle \\ & + \sum_{i=1}^N \left\{ \prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \left(\sum_{\mathbf{k}'} \frac{2V \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_i} \right) \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right\} |0\rangle \end{aligned} \quad (3.40)$$

donde $|\psi_N\rangle = \prod_{l=1}^N \hat{B}_l^\dagger |0\rangle$. De forma que sustituyendo (A.15) en (3.40) y agrupando términos, resulta que

$$\hat{H}_U |\psi_N\rangle = E_N |\psi_N\rangle + \sum_{i=1}^N \left(1 - V \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_i} - 2V \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^N \frac{1}{R_i - R_l} \right) \left(\prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right) |0\rangle, \quad (3.41)$$

donde $E_N = \sum_{j=1}^N R_j$ es la energía de los N pares colectivos y de los N pares de Cooper.

Dado que el propósito de la transformación (3.33) es diagonalizar el hamiltoniano (3.7), el término no diagonal de (3.41) debe ser cero, es decir,

$$\frac{1}{V} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i} + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^N \frac{2}{R_i - R_l} = 0 \quad \forall i = 1, \dots, N \quad (3.42)$$

pues los operadores de pares colectivos de Richardson son linealmente independientes (ver Apéndice A). Estas N ecuaciones se conocen como la solución de Richardson para el caso de N pares de Cooper colocados sobre la superficie de Fermi.

3.2. Solución analítica de la energía total

Dentro del formalismo de la solución de Richardson, como se mostró en la sección anterior, el resultado de resolver la ecuación de Schrödinger para N pares acoplados puede transformarse en resolver un sistema de N ecuaciones algebraicas no lineales acopladas, donde las incógnitas R_i pueden tomar valores complejos. Esto se ve rápidamente pues si conjugamos la solución de Richardson, ecuación (3.42) resulta que

$$\frac{1}{V} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i^*} + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^N \frac{2}{R_l^* - R_i^*} = 0 \quad \forall i = 1, \dots, N, \quad (3.43)$$

entonces si R_i es solución de (3.42) también lo será su complejo conjugado R_i^* . Lo cual era de esperarse ya que la suma de R_i y R_i^* es la energía del bipolar y ésta tiene que ser un número real.

Debido a la forma algebraica de la solución de Richardson, es complicado obtener una solución analítica general, aún para sistemas con un número reducido de pares. En

particular, la complejidad radica esencialmente en que el número de términos en cada ecuación de (3.42) crecen como la suma del número de niveles (M) más el número de pares (N) en el sistema, en consecuencia al poner denominador común en cada ecuación, ésta se convierte a una ecuación de los parámetros R_i con grado $M+N$ aunado al acoplamiento de las N ecuaciones con la misma estructura. A continuación se presenta una solución analítica para el caso de dos pares y dos niveles de energía, cuyas ecuaciones de Richardson son

$$\begin{cases} \frac{1}{V} - \frac{1}{2\varepsilon_1 - R_1} + \frac{1}{2\varepsilon_2 - R_1} + \frac{2}{R_2 - R_1} = 0 \\ \frac{1}{V} - \frac{1}{2\varepsilon_1 - R_2} + \frac{1}{2\varepsilon_2 - R_2} + \frac{2}{R_1 - R_2} = 0 \end{cases}. \quad (3.44)$$

Para este caso, despejando R_2 de la primera ecuación se tiene

$$R_2 = R_1 - \frac{2}{\frac{1}{V} - \frac{1}{2\varepsilon_1 - R_1} + \frac{1}{2\varepsilon_2 - R_1}}. \quad (3.45)$$

Sustituyéndola en la segunda ecuación de (3.44) y factorizando el término $(R_2 - R_1)^{-1}$ obtenemos

$$\frac{1}{V \left(\frac{1}{V} - \frac{1}{2\varepsilon_1 - R_1} - \frac{1}{2\varepsilon_2 - R_1} \right)} - \frac{1}{1 + \frac{2\varepsilon_1 - R_1}{V} - \frac{2\varepsilon_1 - R_1}{2\varepsilon_2 - R_1}} - \frac{1}{1 + \frac{2\varepsilon_2 - R_1}{V} - \frac{2\varepsilon_2 - R_1}{2\varepsilon_1 - R_1}} + 1 = 0. \quad (3.46)$$

Poniendo (3.46) en denominador común, el numerador es la siguiente ecuación de segundo orden para R_1

$$R_1^2 + R_1(2V - 2\varepsilon_1 - 2\varepsilon_2) + (2V^2 + 4\varepsilon_1\varepsilon_2 - 2V\varepsilon_1 - 2V\varepsilon_2) = 0, \quad (3.47)$$

cuya solución es

$$R_1 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - V \pm \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 - V^2}. \quad (3.48)$$

Sustituyendo R_1 en (3.45) se puede determinar explícitamente los parámetros de par, dados por

$$\begin{cases} R_1^\pm = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - V \pm \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 - V^2} \\ R_2^\pm = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - V \mp \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 - V^2} \end{cases}, \quad (3.49)$$

donde puede observarse que $R_1^+ = R_2^-$ y $R_1^- = R_2^+$, por lo que basta con considerar una solución. Tomando $R_1 = R_1^-$ el otro parámetro queda fijo como $R_2 = R_2^+$ y la energía total se encuentra determinada por

$$E_2 = R_1 + R_2 = 2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) - 2V . \quad (3.50)$$

Entonces, se ha logrado obtener una forma explícita de la energía total en términos de los niveles de energía ($\varepsilon_1, \varepsilon_2$) y la interacción entre electrones (V).

El caso más estudiado en la literatura corresponde a un sistema donde los niveles de energía se encuentran equiespaciados [Sierra, 2004], en otras palabras

$$\varepsilon_j = j\varepsilon , \quad (3.51)$$

donde ε es la autoenergía de un electrón en el estado base. Para este caso la solución obtenida de dos pares y dos niveles se reduce en

$$\begin{cases} R_1 = 3\varepsilon - V - \sqrt{\varepsilon^2 - V^2} \\ R_2 = 3\varepsilon - V + \sqrt{\varepsilon^2 - V^2} \end{cases} \Rightarrow E_2 = 6\varepsilon - 2V . \quad (3.52)$$

En la Figura 3.1 se muestra la variación de R_1 , R_2 y E_2 como función de la interacción electrón-electrón (V).

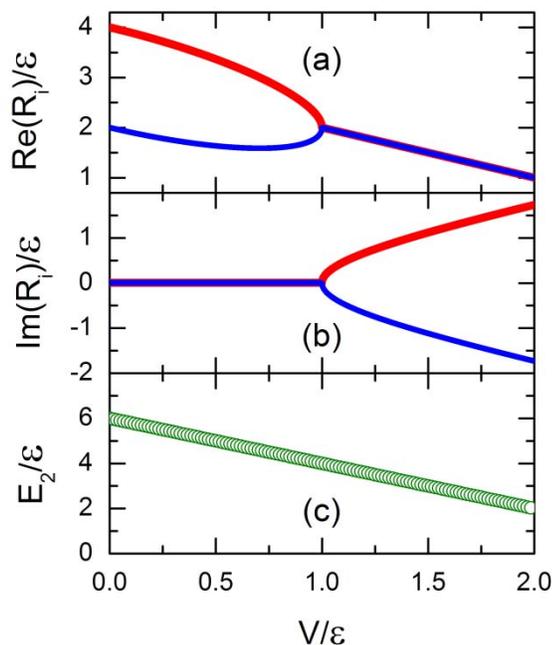


Figura 3.1. (a) Parte real [$\text{Re}(R_m)$], (b) la parte imaginaria [$\text{Im}(R_m)$] de la solución de Richardson y (c) la energía total como función de la interacción atractiva electrón-electrón (V) para un sistema de dos pares cuyas energías sin interacción son 2ε y 4ε respectivamente.

Obsérvese de la Figura 3.1 que en ausencia de interacción electrón-electrón, $V=0$, los parámetros R_i son $2\varepsilon_i$. De hecho, de la forma de la solución de Richardson (3.42) se cumple en general que

$$\lim_{V \rightarrow 0} R_i = 2\varepsilon_i, \quad (3.53)$$

lo cual establece que en ausencia de interacción los pares colectivos son pares de electrones. Además, cuando la interacción $V > \varepsilon$, los parámetros R_i se convierten en números complejos y son conjugados entre sí. La asociación de estos pares colectivos en $V > \varepsilon$ se presenta a través de sus parte imaginarias, de tal forma que en esta región de interacción los dos pares se asocian para cambiar su comportamiento. Por último, la Figura 3.1(c) muestra que la energía es una función monótona decreciente.

Por otro lado, se han realizado numerosos intentos por obtener soluciones analíticas de las ecuaciones algebraicas de Richardson, incluyendo soluciones aproximadas. Por ejemplo una expresión para la energía total de N pares en el estado base es [Pogosov, 2011]

$$E_N \approx NE_1 + \frac{N(N-1)}{2} E_{\text{int}}, \quad (3.54)$$

donde E_1 es la energía de un solo par obtenida en (2.13) al resolver el problema de Cooper y E_{int} es la energía de interacción entre dos pares determinada como

$$E_{\text{int}} = \frac{1}{D(E_F)} \left\{ \frac{1}{2} + \left[\exp\left(\frac{2}{VD(E_F)}\right) - 1 \right]^{-1} \right\}, \quad (3.55)$$

donde $D(E_F)$ es la densidad de estados constante cerca de la superficie de Fermi y V la interacción electrón-electrón.

3.3. Resultados numéricos para N pares

Con el objetivo de estudiar la solución de las ecuaciones de Richardson se desarrolló un programa numérico en FORTRAN 90, basado en el método de Newton-Raphson para un sistema de ecuaciones no lineales con soluciones complejas. En este método, dada una interacción V entre electrones, se resuelven las ecuaciones de Richardson para los parámetros R_i como incógnitas. Además, se obtiene la energía total del sistema como la suma de éstos.

En el análisis que se muestra a continuación se presentan las soluciones, así como el comportamiento de R_i para diferentes sistemas con un amplio rango de interacción electrón-electrón. En dicho análisis, se consideró la distribución equiespacial de los niveles de energía de un solo electrón y además el número de niveles se tomó como el doble del número de pares.

- **Degeneración en los niveles energéticos**

A pesar de que dos pares no pueden ocupar el mismo nivel energético $\epsilon_{\mathbf{k}}$, debido al carácter fermiónico de los electrones, analizamos el caso en que dos de estos niveles se encuentran muy cercanos uno del otro y por lo tanto puede pensarse que el sistema tiene una degeneración. De forma que en el caso de cinco pares y diez niveles de energía, desplazamos los niveles 2ϵ y 3ϵ a $5\epsilon/2 - \epsilon/20$ y $5\epsilon/2 + \epsilon/20$, como se muestra en la Figura 3.2.

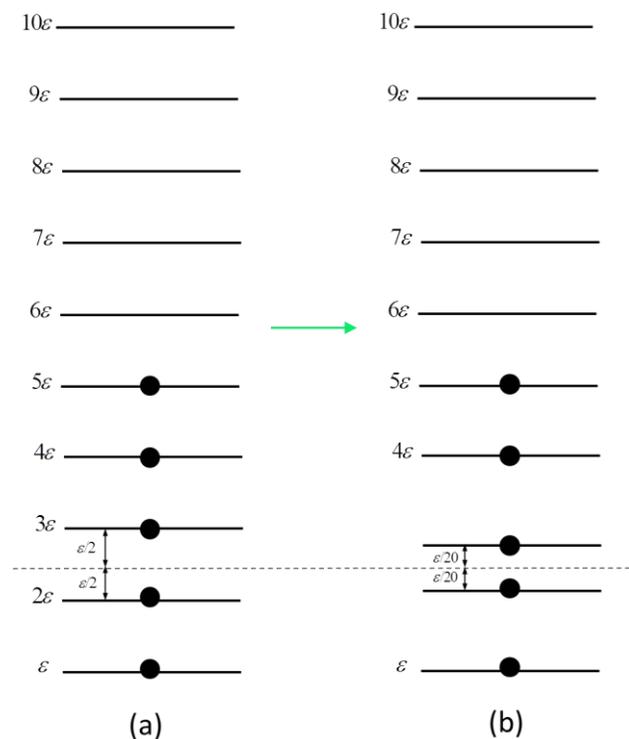


Figura 3.2. Esquema de (a) la distribución de niveles de energía (líneas) sin degeneración y (b) la distribución de niveles con degeneración desplazando respectivamente 2ϵ y 3ϵ a $5\epsilon/2 - \epsilon/20$ y $5\epsilon/2 + \epsilon/20$, para el estado base de 5 pares (bolas) en 10 niveles.

En la Figura 3.3 se presentan la parte (a, a') real y (b, b') imaginaria de los parámetros R_i , así como (c, c') la energía total de la solución de Richardson como función de la interacción electrón-electrón V , para el caso de 5 pares en 10 niveles energéticos (a-c) sin y (a'-c') con degeneración. Para el caso con degeneración, los pares tienen energía en ausencia de interacción electrón-electrón de 2ε , 4.9ε , 5.1ε , 8ε y 10ε . En otras palabras, el sistema se encuentra en su estado base tanto para el caso con degeneración como para el caso sin degeneración.

Como se observa en el recuadro de la Figura 3.3(a'), las pares colectivos cuasidegenerados se asocian rápidamente en el rango de interacciones débiles ($\sim 0.05\varepsilon$), en contraste al caso no degenerado ($\sim 0.68\varepsilon$). Además, las soluciones R_i que se asocian son números complejos conjugados, como se muestra en las Figuras 3.3(b) y 3.3(b'). De forma que la energía total es una cantidad real.

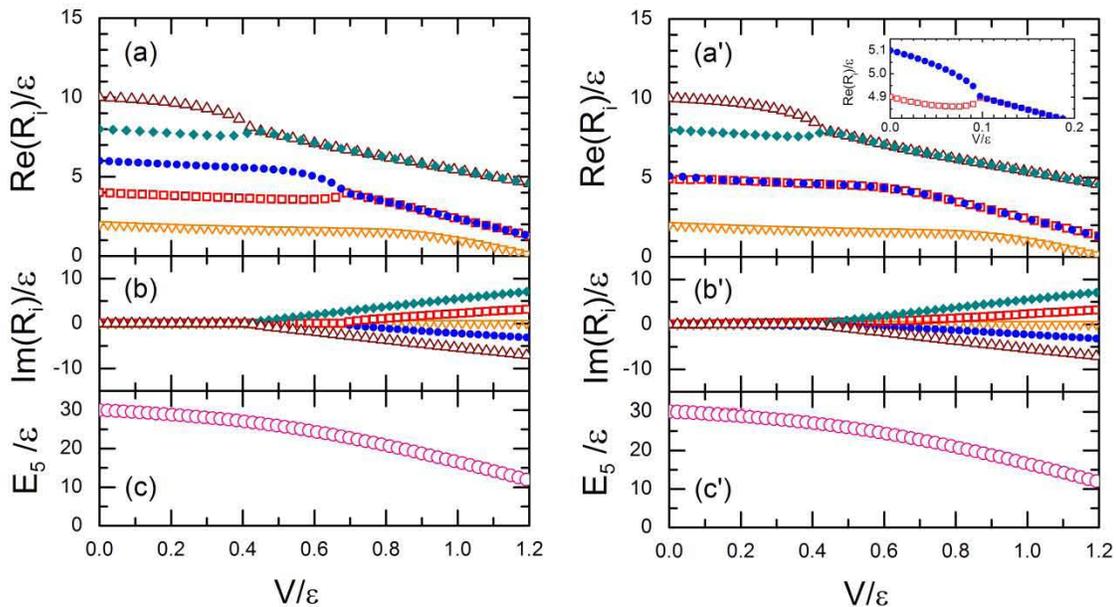


Figura 3.3. (a, a') Parte real [$\text{Re}(R_i)$], (b, b') parte imaginaria [$\text{Im}(R_i)$] y (c, c') la energía total de la solución de Richardson como función de la interacción atractiva electrón-electrón (V) para un sistema de 5 pares en 10 niveles energéticos (a-c) sin y (a'-c') con degeneración.

En la Figura 3.4 se muestra la energía total para los sistemas de la Figura 3.3 con y sin degeneración. Nótese que para el caso de un estado degenerado equidistante la asociación de los pares colectivos a distintos valores de interacción electrón-electrón, no cambia la energía total del sistema. En la Figura 3.5 se muestra otra comparativa del sistema con y sin degeneración donde además se presenta un tercer caso en el cual

desplazamos los niveles ε y 2ε a $3\varepsilon/2 - \varepsilon/20$ y $3\varepsilon/2 + \varepsilon/20$. Como se observa en la Figura 3.5(c, c', c'') la energía total para los tres sistemas no cambia, dentro de la precisión de los cálculos numérico. Sin embargo, la asociación entre pares es distinta para cada sistema degenerado. Primeramente para ambos casos, la degeneración ocasiona asociación entre los pares que ocupan los niveles degenerados, como se muestra en los recuadros de las Figuras 3.5(a') y 3.5(a''). Después, para una interacción aproximadamente de $V \approx 0.78\varepsilon$, el segundo sistema degenerado rompe la asociación inicial para volver a asociarse pero ahora con el par vecino no degenerado más próximo, lo cual permite que éste baje y en consecuencia la energía total disminuya.

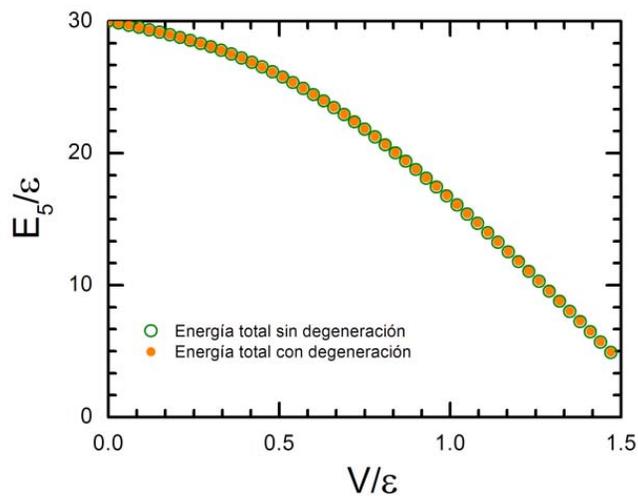


Figura 3.4. Energía total vs la interacción atractiva electrón-electrón (V) para los mismo sistemas de la Figura 3.3 con (puntos naranjas) y sin (círculos verdes) degeneración .

Cabe enfatizar que la energía total del sistema puede cambiar al considerar otro tipo de degeneración. Por ejemplo, si el desplazamiento de los niveles degenerados no es equidistante a partir del punto medio de las energías originales de un solo electrón, la energía total de los sistemas con y sin degeneración no será igual.

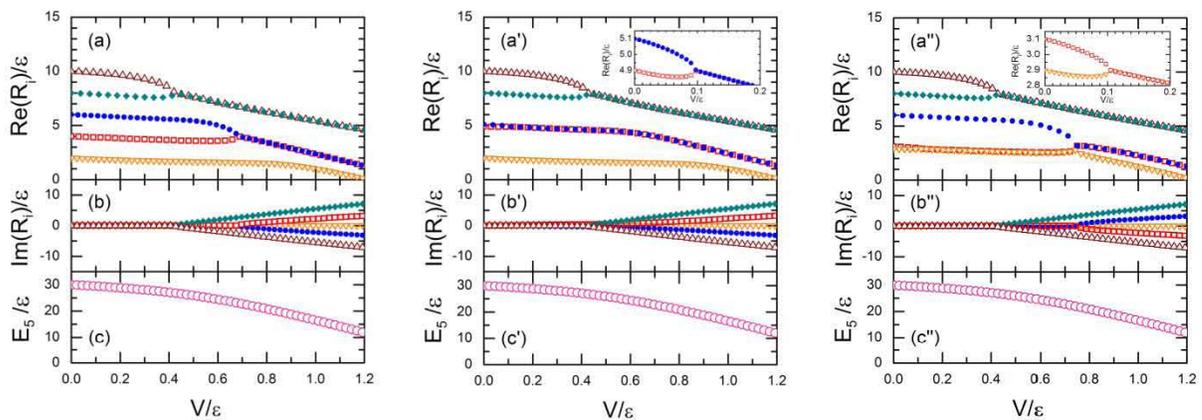


Figura 3.5. (a, a', a'') Parte real $[\text{Re}(R_i)]$, (b, b', b'') parte imaginaria $[\text{Im}(R_i)]$ y (c, c', c'') la energía total de la solución de Richardson como función de la interacción atractiva electrón-electrón (V) para un sistema de 5 pares en 10 niveles energéticos (a-c) sin y (a'-c', a''-c'') con degeneración.

• Repulsión Cuántica

A continuación analizaremos los efectos del número total de niveles en las soluciones de Richardson. Consideremos un sistema de 30 pares en el estado base con 40 y 100 niveles de energía, como se muestra respectivamente en la Figura 3.5(a) y 3.5(b).

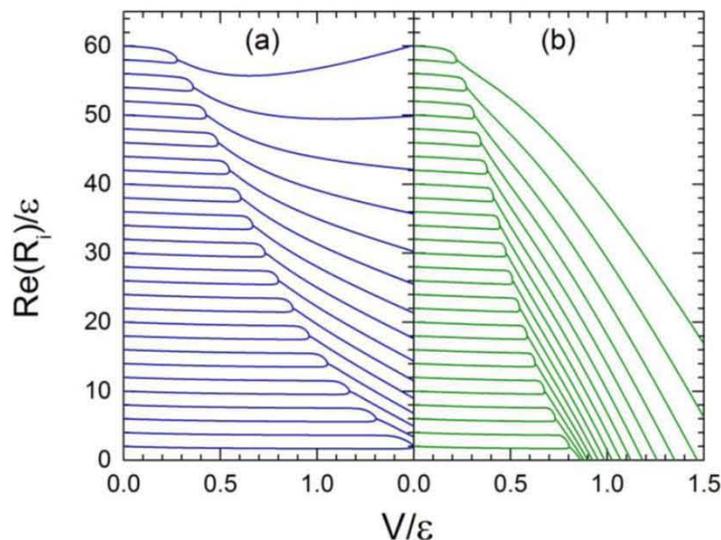


Figura 3.6. Parte real $[\text{Re}(R_i)]$ de R_i para un sistema de 30 pares en (a) 40 y (b) 100 niveles versus la interacción atractiva electrón-electrón (V), cuando el sistema se encuentra en el estado base.

Obsérvese en la Figura 3.6 que la asociación entre pares de mayor energía requiere una menor interacción atractiva electrón-electrón (V). Además, dicha asociación necesita una menor interacción cuando el número total de niveles crece. Asimismo, las soluciones

R_i decrecen con mayor rapidez para el caso de 100 niveles, en comparación con aquellas del caso de 40 niveles. Este hecho conduce a un comportamiento global en la energía total del sistema, como se muestra en la Figura 3.7 para un sistema de 30 pares en el estado base con 40, 50, 60, 70, 80, 90 y 100 niveles.

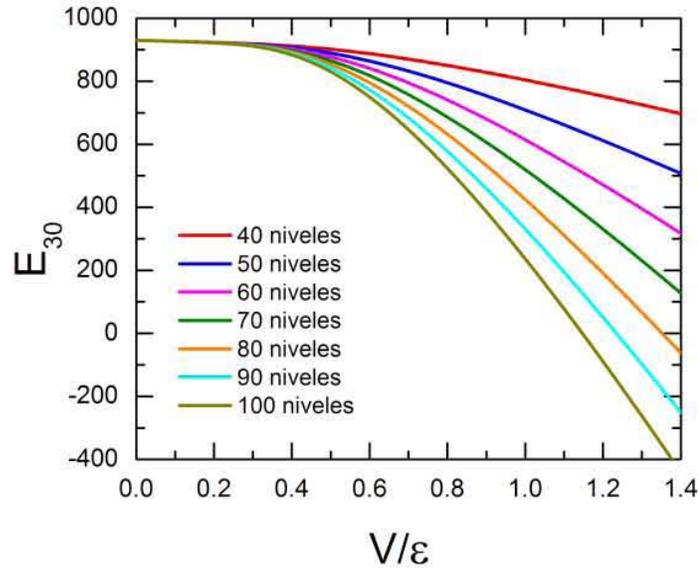


Figura 3.7. Energía total (E_{30}) para un sistema de 30 pares de electrones en el estado base versus la interacción atractiva electrón-electrón (V) para distintos números de niveles como se indica en la Figura 3.6.

En la Figura 3.7 se puede observar que la separación entre curvas va disminuyendo, el cual sugiere que en el límite cuando el número de niveles tiende a infinito la curva de energía se acerca asintóticamente a un comportamiento límite.

- **Estado Base y Estados Excitados**

Hasta aquí, hemos estudiado únicamente los estados base de la solución de Richardson. En general, a temperatura finita los pares pueden ocupar estados excitados. Estas configuraciones excitadas de pares colectivos podrían conducir a nuevas reglas de asociación entre dichos pares. Un ejemplo de estas configuraciones se presenta en la Figura 3.8, donde los estados excitados se indican por líneas rojas.

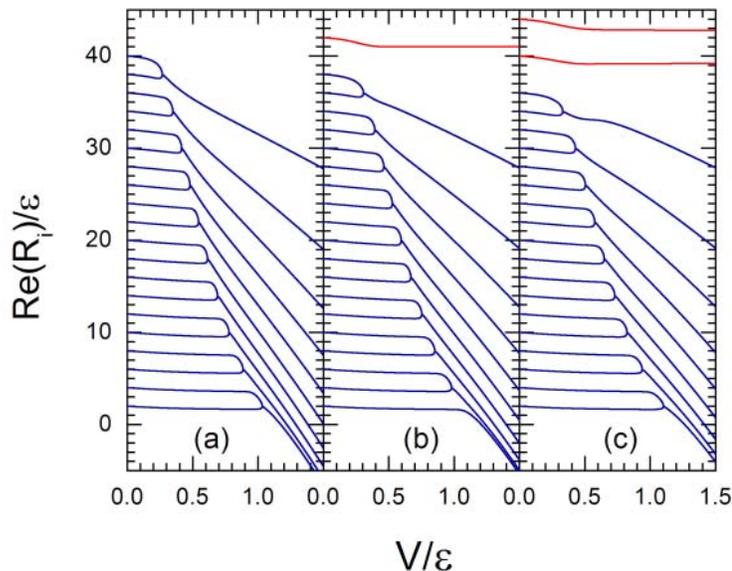


Figura 3.8. Parte real $[\text{Re}(R_i)]$ de R_i para (a) el estado base, (b) el primer estado excitado y (c) otro estado excitado como función de la interacción electrón-electrón (V) para un sistema de 20 pares y 40 niveles de energía equiespaciados.

En las Figuras 3.8(b) y 3.8(c) se puede notar la existencia de barreras que inhiben el cruzamiento de pares no asociados al nivel de menor energía más próximo. Por lo que una de las consecuencias más importantes de la asociación entre pares colectivos es la libertad de disminuir su energía. Además, como puede observarse en la Figura 3.8, durante dicha asociación dos de los parámetros R_i se igualan para después convertirse en números complejos conjugados.

Suponiendo que los pares colectivos \hat{B}_i^\dagger y \hat{B}_j^\dagger se asocian, de la ecuación de Richardson para cada par

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{V} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i} + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^N \frac{2}{R_l - R_i} = 0 \\ \frac{1}{V} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_j} + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq j}}^N \frac{2}{R_l - R_j} = 0 \end{array} \right. , \quad (3.56)$$

se tiene que si $R_i = R_j$, entonces los términos $2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i$ y $2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_j$ deben ser cero para anular la divergencia del término $(R_i - R_j)^{-1}$ en (3.56). De forma que en la interacción electrón-electrón (V) a la cual ocurre la asociación resulta que

$$R_i = R_j = 2\varepsilon_{\mathbf{k}}, \quad (3.57)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es el nivel de energía más cercano a ambos durante la asociación.

- **Asociación de Pares**

El fenómeno de asociación de pares colectivos puede pensarse físicamente como cuatro electrones interactuando o un cúmulo de cuatro electrones, lo que llamamos en esta tesis bipar. Formalmente, denominamos asociación de pares colectivos al fenómeno que ocurre cuando dos de los parámetros R_i , soluciones de las ecuaciones de Richardson, se convierten en números complejos conjugados. Además, dado que cada parámetro representa un par colectivo la asociación entre éstos puede interpretarse como un apareamiento entre pares de electrones. De forma que este nuevo bipar colectivo debe ser un cúmulo de cuatro electrones.

Es importante mencionar que dicha asociación es mucho más compleja de lo que hemos presentado en las Figuras anteriores. Un ejemplo de esta complejidad se muestra en la Figura 3.9, donde se presenta la parte real de R_i obtenidas de las ecuaciones de Richardson para un sistema de 20 pares y 40 niveles de energía equiespaciados. Los primeros 14 pares de este sistema se colocaron en los niveles de menor energía permitidos por el principio de exclusión de Pauli y los últimos 6 pares se colocaron en los niveles con energía sin interacción de 17ε , 18ε , 19ε , 20ε , 22ε y 23ε . Cabe mencionar que la Figura 3.9 reproduce los resultados reportados en la referencia [Sierra, 2004]; hecho que verifica la funcionalidad del programa desarrollado.

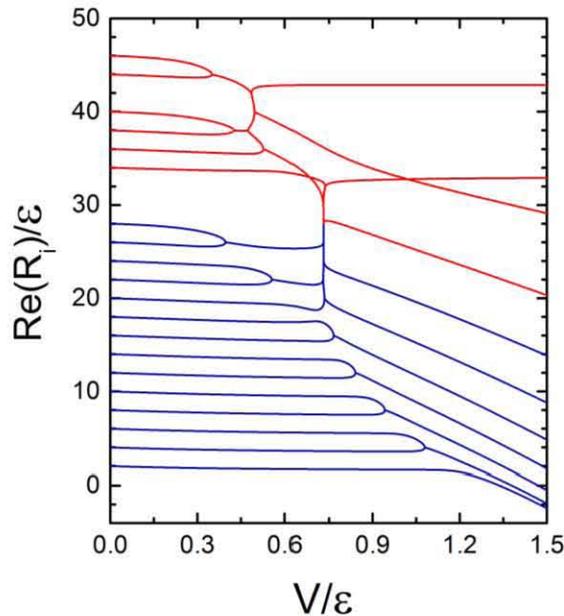


Figura 3.9. Parte real $[\text{Re}(R_i)]$ de R_i vs la interacción (V) para un sistema en un estado excitado de 20 pares y 40 niveles.

En la Figura 3.9 puede observarse que la segunda y tercera líneas rojas (de arriba a abajo) se intersectan pero no se asocian, lo cual sugiere que el fenómeno de asociación sólo ocurre entre dos pares colectivos. Además, la tercera línea roja incrementa como función de la interacción electrón-electrón (V), el cual puede deberse a la repulsión cuántica similar a lo ocurrido en la Figura 3.6.

Otro ejemplo de estados excitados en un sistema con un número reducido de niveles se muestra en la Figura 3.10, donde se observa que la asociación y re-asociación entre pares colectivos podría modificar la concavidad de la curva de energía.

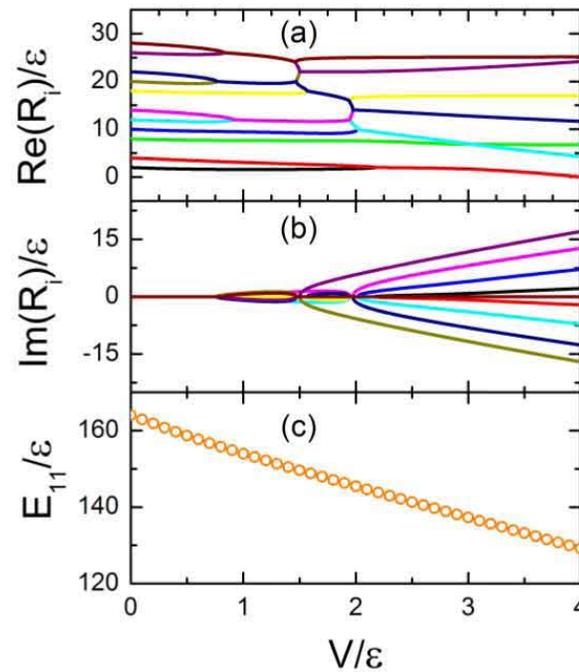


Figura 3.10. Parte (a) real [$\text{Re}(R_i)$] y (b) imaginaria [$\text{Im}(R_i)$] de R_i , así como (c) la energía total vs la interacción (V) para un sistema excitado de 11 pares y 14 niveles.

- **Tiempo de Cómputo**

Dado la ausencia hasta la fecha de una solución analítica general del problema cuántico de muchos cuerpos, dicho problema se analiza numéricamente. Una de las limitaciones más importantes es el tiempo de cómputo. En esta tesis se presenta un análisis del tiempo de cómputo al obtener la energía total del sistema mediante las ecuaciones de Richardson.

En la Figura 3.11 se presenta una gráfica del tiempo de cómputo contra el número de pares manteniendo el número de niveles equiespaciados como el doble del número de

pares. El cálculo numérico se realizó en la supercomputadora *HP Cluster Platform 3000SL* “Miztli” ubicada en la Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación (DGCTIC) de la UNAM, la cual se basa en procesadores de Intel E5-2670 con 8 *Cores* por procesador y una memoria RAM de 64 GB por nodo de dos procesadores. De los cuales se utilizó únicamente un sólo *Core* para el estudio del tiempo de cómputo, ya que el programa presentado en el apéndice B no se encuentra paralelizado.

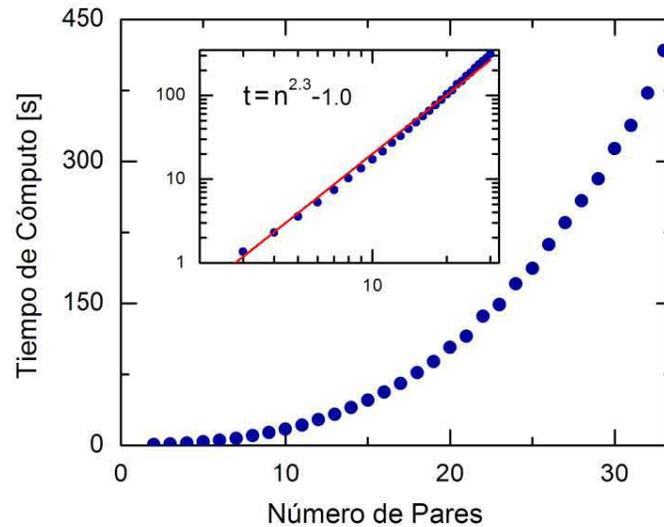


Figura 3.11. Tiempo computacional contra número de pares ejecutado en la supercomputadora “Miztli” de la UNAM.

Obsérvese en la Figura 3.11 un crecimiento en forma de potencias del tiempo de cómputo como función del número de pares. Para determinar dicha potencia, se realizó un análisis *log-log* presentado en el recuadro de la Figura 3.11, en el cual se observa una pendiente de 2.3 con una precisión (R^2) de ajuste de 0.99. Cabe mencionar que el tiempo de cómputo para resolver la ecuación de Schrödinger estacionaria mediante diagonalización de matrices crece como N^3 para un sistema formado por una sola partícula y N estados disponibles sin simetría. Por lo que la potencia obtenida de 2.3 para un problema de muchos pares es significativamente menor que haberlo realizado directamente mediante diagonalización.

Conclusiones

En esta tesis se analizó el problema de muchos pares correlacionados partiendo del hamiltoniano BCS y utilizando la transformación de Richardson, la cual reduce la ecuación de Schrödinger a un conjunto de ecuaciones algebraicas no lineales acopladas. En particular, se presenta una solución analítica para el caso de dos pares en dos niveles de energía. Para el estudio numérico de las ecuaciones de Richardson, se desarrolló un nuevo software aplicando el método de Newton-Raphson multidimensional para la búsqueda de soluciones complejas. Las conclusiones más importantes de esta tesis pueden resumirse como sigue.

1. Para el problema de muchos pares, se observa un fenómeno de asociación entre dos pares. Esta asociación permite cruzar las barreras del nivel de menor energía más próximo para reducir la energía total del sistema.
2. La asociación entre dos pares colectivos (bipares) de mayor energía se presenta en una interacción atractiva electrón-electrón de menor intensidad. Asimismo, los resultados revelan que el comportamiento de los bipares es imposible de realizar por pares colectivos individuales.
3. El análisis del número de niveles de energía revela una clara repulsión cuántica. Los resultados apuntan a la existencia de un comportamiento límite cuando el número de niveles tiende a infinito.
4. Al reducir el número de niveles disponibles, se observa un comportamiento anómalo de los pares asociados, en el cual la parte real de algunos R_i aumenta con la interacción atractiva electrón-electrón.
5. El estudio del tiempo de cómputo en resolver las ecuaciones de Richardson revela que la transformación en ecuaciones algebraicas sí reduce significativamente el tiempo de cómputo, permitiendo analizar sistemas de 1000 pares en 2000 niveles.

Cabe enfatizar que la mayor parte de los estudios realizados en esta tesis fueron numéricos, sin embargo los resultados son exactos dentro de las aproximaciones del hamiltoniano. En general, considero que el problema de muchos cuerpos y en particular el fenómeno de superconductividad continúan siendo un reto para la Física Teórica. Por lo que los avances en esta dirección más allá de la aproximación de campo medio podrían ser de fundamental importancia para el entendimiento de muchos fenómenos físicos.

Apéndice A. Pares colectivos de Richardson

En este apéndice se muestran algunas propiedades de conmutación que cumplen los operadores de pares colectivos de Richardson utilizados para obtener las ecuaciones de Richardson para el caso en que se tiene un sistema de N pares electrónicos colocados sobre la superficie de Fermi. El operador de creación de dichos pares colectivos se define como

$$\hat{B}_j^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_j}, \quad (\text{A.1})$$

y el operador de aniquilación

$$\hat{B}_j = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hat{b}_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_j^*}. \quad (\text{A.2})$$

A continuación se presentan algunas reglas de conmutación que satisfacen los operadores de pares colectivos, las cuales fueron utilizadas en el capítulo tres.

$$\begin{aligned} [\hat{B}_i^\dagger, \hat{B}_j^\dagger] &= [\hat{B}_i, \hat{B}_j] = 0 \\ [\hat{B}_i, \hat{B}_j^\dagger] &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{1}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i^*)(2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_j)} [\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 - 2\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i^*)(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_j)}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

además,

$$\begin{aligned} [\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{B}_j^\dagger] &= \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_j} [\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \frac{1 - 2\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_j} \\ [\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{B}_j^\dagger] &= \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_j} [\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

y

$$[\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}, \hat{B}_j^\dagger] = \sum_{\mathbf{k}''} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}''} - R_j} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger [\hat{b}_{\mathbf{k}'}, \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger] + [\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger] \hat{b}_{\mathbf{k}'} = \frac{\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger - 2\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}''}^\dagger}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_j}. \quad (\text{A.5})$$

Nótese que si $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ entonces

$$[\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{B}_j^\dagger] = \frac{\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_j}, \quad (\text{A.6})$$

por principio de exclusión de Pauli.

Por otro lado, el conmutador de la función de onda (3.32) con el hamiltoniano (3.7) es

$$\left[\hat{H}_U, \prod_{i=1}^N \hat{B}_i^\dagger \right] = \sum_{i=1}^N \left\{ \prod_{k=1}^{i-1} \hat{B}_k^\dagger \left[\hat{H}_U, \hat{B}_i^\dagger \right] \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right\} \quad (\text{A.7})$$

y el conmutador que resulta dentro de la suma (A.7) es

$$\left[\hat{H}_U, \hat{B}_i^\dagger \right] = \sum_{\mathbf{k}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} \left[\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{B}_i^\dagger \right] - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}, \hat{B}_i^\dagger \right] = \sum_{\mathbf{k}} \left(2\varepsilon_{\mathbf{k}} \frac{\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i} - V \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger - 2\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_i} \right). \quad (\text{A.8})$$

De forma que sumando y restando $\sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger$, (A.8) se reescribe como

$$\left[\hat{H}_U, \hat{B}_i^\dagger \right] = R_i \hat{B}_i^\dagger + \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \left(1 - V \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_i} \right) + V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{2\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_i}, \quad (\text{A.9})$$

donde se utilizó que $\hat{B}_i^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} (2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i)^{-1} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger$.

Para tratar el último término que resulta de (3.40) consideremos el siguiente conmutador

$$\left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{2V\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i}, \prod_{l=1}^N \hat{B}_l^\dagger \right] = \sum_{l=1}^N \left\{ \prod_{h=1}^{l-1} \hat{B}_h^\dagger \left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{2V\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i}, \hat{B}_l^\dagger \right] \prod_{j=l+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right\}, \quad (\text{A.10})$$

donde el conmutador que aparece dentro de la suma es

$$\left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{2V\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i}, \hat{B}_l^\dagger \right] = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{2V\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger (1 - 2\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'})}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i)(2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_i)} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{2V\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i)(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i)}. \quad (\text{A.11})$$

Separando el denominador por fracciones parciales

$$\left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{2V\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i}, \hat{B}_l^\dagger \right] = \sum_{\mathbf{k}} \frac{2V\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger}{(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i)(2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i)} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{2V}{R_i - R_l} \left(\frac{\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i} - \frac{\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_l} \right) = 2V \frac{\hat{B}_i^\dagger - \hat{B}_l^\dagger}{R_i - R_l} \quad (\text{A.12})$$

y sustituyendo (A.12) en (A.10)

$$\left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{2V\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i}, \prod_{l=1}^N \hat{B}_l^\dagger \right] = \sum_{l=1}^N \left\{ \prod_{h=1}^{l-1} \hat{B}_h^\dagger \left(2V \frac{\hat{B}_i^\dagger - \hat{B}_l^\dagger}{R_i - R_l} \right) \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right\}. \quad (\text{A.13})$$

Finalmente, si sustituimos (A.13) en el último sumando de (3.40) obtenemos

$$\sum_{i=1}^N \left\{ \prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{2V\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_i} \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right\} |0\rangle = \sum_{i=1}^N \left\{ \prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \left[\sum_{j=i+1}^N \left(\prod_{h=i+1}^{j-1} \hat{B}_h^\dagger 2V \frac{\hat{B}_i^\dagger - \hat{B}_j^\dagger}{R_i - R_j} \prod_{q=j+1}^N \hat{B}_q^\dagger \right) \right] \right\} |0\rangle \quad (\text{A.14})$$

puesto que $\prod_{l=1}^N \hat{B}_l^\dagger \sum_{\mathbf{k}} \frac{2V\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}} - R_i} |0\rangle = 0$. Factorizando

$$\sum_{i=1}^N \left\{ \prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{2V\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}'}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - R_i} \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right\} |0\rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^N \frac{2V}{R_i - R_l} \left(\prod_{l=1}^{i-1} \hat{B}_l^\dagger \sum_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \prod_{j=i+1}^N \hat{B}_j^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{A.15})$$

Por otro lado, tomando en cuenta que hay N pares electrónicos y N distintos niveles de energía de una sola partícula, la transformación, o cambio de base, (A.1) puede reescribirse en forma matricial de la siguiente manera.

$$\begin{pmatrix} \hat{B}_1^\dagger \\ \hat{B}_2^\dagger \\ \vdots \\ \hat{B}_N^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2\varepsilon_1 - R_1} & \frac{1}{2\varepsilon_2 - R_1} & \cdots & \frac{1}{2\varepsilon_N - R_1} \\ \frac{1}{2\varepsilon_1 - R_2} & \frac{1}{2\varepsilon_2 - R_2} & \cdots & \frac{1}{2\varepsilon_N - R_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2\varepsilon_1 - R_N} & \frac{1}{2\varepsilon_2 - R_N} & \cdots & \frac{1}{2\varepsilon_N - R_N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}_1^\dagger \\ \hat{b}_2^\dagger \\ \vdots \\ \hat{b}_N^\dagger \end{pmatrix}, \quad (\text{A.16})$$

donde el vector que contiene los pares de Cooper \hat{b}_k^\dagger tiene dimensión N y el subíndice de cada par electrónico corresponde al nivel de energía en el que se encuentra. Si además reescribimos la transformación (A.16) como

$$\mathbf{B}^\dagger = \mathbf{U}\mathbf{b}^\dagger, \quad (\text{A.17})$$

donde \mathbf{B}^\dagger es el vector que contiene los operadores de pares colectivos, \mathbf{U} la matriz de cambio de base y \mathbf{b}^\dagger el vector que contiene los operadores de pares de Cooper. Las condiciones para que \mathbf{U} sea unitaria son

$$\begin{cases} |A_i|^2 \sum_{j=1}^N \frac{1}{(2\varepsilon_j - R_i)^2} = 1, \quad \forall i \in \{1, \dots, N\} \\ \sum_{j=1}^N \frac{1}{(2\varepsilon_j - R_i^*)(2\varepsilon_j - R_k)} = 0, \quad \forall i, k \in \{1, \dots, N\} \end{cases}, \quad (\text{A.18})$$

que es equivalente a pedir que los estados $\hat{B}_j^\dagger|0\rangle$ estén normalizados y además sean linealmente independientes, con A_i la constante de normalización del estado $\hat{B}_i^\dagger|0\rangle$.

Apéndice B. Código

En este apéndice se presenta el código, programado en FORTAN 90, para obtener las soluciones de las ecuaciones de Richardson en general para N pares.

```

program richardson
IMPLICIT NONE
integer :: par,niv,i,k,h,l,o,itera,paso
real(16) :: prec,epsilon,start,finish,gmax
complex(16), allocatable :: x(:),xi(:),xo(:),Fx(:)
real(16), allocatable :: densidad(:)
character(len=5) :: contador,pares,niveles,interaccion

!Numero de niveles, pares y densidad de niveles
par=5
niv=2*par
allocate (x(par),xi(par),xo(par),Fx(par),densidad(niv))

!Llenado de la densidad de niveles
do i=1,niv
densidad(i)=2*i
if(i==3) then
densidad(i)=densidad(i-1)+.01
end if
end do

!Llenado del vector de condiciones iniciales
epsilon=1E-7
do i=1,par
xo(i)=CMPLX(densidad(i),0.0)
end do
call iniciales(epsilon,par,xo,xi)

!Llamar a NR con la precision de la solución y calcula el tiempo de ejecucion
prec=1E-10
call cpu_time(start)
call nr(xi,x,Fx,densidad,prec,par,niv,gmax,itera,paso)
call cpu_time(finish)
write(pares,"(I3.0)") par
write(niveles,"(I3.0)") niv
write(interaccion,"(F5.1)") gmax
open(7,file="parametros"//pares//"pares_"//niveles//"niveles_"//interaccion//".dat",status="REPLACE",action="WRITE")

```

```

write(7,10) "Pares:",par
write(7,10) "Niveles:",niv
write(7,20) "Precision NR:",prec
write(7,10) "Iteraciones NR:",itera
write(7,30) "Max. interaccion:",gmax
write(7,10) "Paso interaccion:",paso
write(7,30) "Tiempo[s]:",finish-start
write(7,30) "Tiempo[min]:",(finish-start)/60.
10  format(" ",A20,I20)
20  format(" ",A20,E20.1)
30  format(" ",A20,F20.5)
end program

```

!-----Subrutina para llenar las condiciones de los pares -----

!NOTAS:Las sumas no llevan ordenaysuma pues son complejos

```

subroutine iniciales(epsylon,m,xo,xi)
IMPLICIT NONE
integer, intent(in) :: m
real(16), intent(in) :: epsylon
complex(16), dimension(m), intent(in) :: xo
complex(16), dimension(m), intent(out) :: xi
integer :: i
do i=1,m
xi(i)=xo(i)-epsylon
end do
end subroutine

```

!-----Subrutina Newton-Raphson -----

```

subroutine nr(xi,x,Fx,densidad,prec,m,n,gmax,itera,h)
IMPLICIT NONE
complex(16), dimension(m), intent(in) :: xi
real(16), dimension(n), intent(in) :: densidad
real(16), intent(in) :: prec
integer, intent(in) :: m,n
complex(16), dimension(m), intent(out) :: x,Fx
real(16), intent(inout) :: gmax
integer, intent(inout) :: h,itera
complex(16), dimension(m,m) :: J,invJ
complex(16), dimension(m) :: E,E_ant,x_ant,Delta
real(16) :: g,g_ant,g_nueva,magnitud,paso,dif,dE,agrega
complex(16) :: energia
integer :: i,l,k,refinar
character(len=5) :: pares,niveles
write(pares,"(I3.0)") m
write(niveles,"(I3.0)") n
open(1,file=pares//pares_//niveles//niveles.dat,status="REPLACE",action="WRITE")

```

```

open(2,file="E.dat",status="REPLACE")
open(3,file="magnitud.dat",status="REPLACE")
open(4,file="dif.dat",status="REPLACE",action="WRITE")
open(5,file="energia"//pares//"pares_"//niveles//"niveles.dat",status="REPLACE",action="WRI
TE")

```

!Diferencia entre la solución nueva y la anterior, magnitud máxima de la interacción, paso de la interacción, el número máximo de iteraciones que tiene el método de NR para encontrar la solución

```

dE=1.
gmax=1.5
h=100000
paso=gmax/h
g=paso
g_ant=0.
g_nueva=paso
itera=10000
refinar=0
agrega=1E-4
!Inicia NR
x=xi
E_ant=xi
call ceros(m,1,E)
do while (g .LT. gmax)
do while (l .LT. itera)
call F(m,n,g,x,densidad,Fx,J)
call invers(m,J,invJ)
E=x-matmul(invJ,Fx)
!call mulmatrix(m,m,m,1,invJ,Fx,Delta)
!E=x-Delta
call norma(m,Fx,magnitud)
write(3,*) magnitud
if (magnitud .NE. magnitud) l=itera
if (magnitud<=prec) then
call norma(m,E-E_ant,dif)
write(4,*) dif
if (dif<=dE) then
g_ant=g_nueva
x_ant=E
E_ant=E
do i=1,m
!write(2,*) E(i)
energia=E(i)+energia
end do
write(5,"(3F20.12)") g,REAL(energia),AIMAG(energia)
do i=1,m
if (i .EQ. 1) then

```

```

write(1,"(3F20.12)",advance="NO") g,REAL(E(i)),AIMAG(E(i))
else
write(1,"(2F20.12)",advance="NO") REAL(E(i)),AIMAG(E(i))
end if
end do
write(1,*)
energia=CMPLX(0.0,0.0)
x=E
g=paso+g_ant
print*,g
g_nueva=g
refinar=0
exit
else if (dif>dE) then !Que pasa si es otra solucion
refinar=1+refinar
call perturbacion(x_ant,m,agrega,2,x)
g=g_ant+abs(g_nueva-g_ant)/(2.**refinar)
call F(m,n,g,x,densidad,Fx,J)
call invers(m,J,invJ)
E=x-matmul(invJ,Fx)
x=E
g=g_nueva
l=0
end if
else if (magnitud>prec .OR. magnitud==magnitud) then !Que pasa si no es solucion o es NaN
x=E
l=l+1
end if
end do
if (l==itera) then
refinar=1+refinar
call perturbacion(x_ant,m,agrega,2,x)
g=g_ant+abs(g_nueva-g_ant)/(2.**refinar)
end if
l=0
end do
end subroutine

```

!-----Subrutina que calcula Fx y J-----!

!NOTAS:Las sumas no llevan ordenaysuma pues son complejos

```

subroutine F(m,n,g,x,densidad,Fx,J)
IMPLICIT NONE
integer, intent(in) :: m,n
real(16), intent(in) :: g
complex(16), dimension(m), intent(in):: x
complex(16), dimension(m), intent(out):: Fx

```

```

real(16), dimension(n), intent(in) :: densidad
complex(16), dimension(m,m), intent(out):: J
complex(16), dimension(m) :: s1,s2,ds1,ds2
integer :: i,k
complex(16) :: aux,aux2
do i=1,m
  aux=0
  aux2=0
  do k=1,n
    aux=1./(densidad(k)-x(i))+aux
    aux2=1./(densidad(k)-x(i))**2+aux2
  end do
  s1(i)=aux
  ds1(i)=aux2
end do
do i=1,m
  aux=0
  aux2=0
  do k=1,m
    if (k/=i .AND. m/=1)then
      aux=2./(x(k)-x(i))+aux
      aux2=2./(x(k)-x(i))**2+aux2
    else if (k==i .AND. m/=1) then
      aux=aux
      aux2=aux2
    else if (m==1) then
      aux=0
      aux2=0
    end if
  end do
  s2(i)=aux
  ds2(i)=aux2
end do

```

!Llenado de Fx y J

```

do i=1,m
  Fx(i)=1./g-s1(i)+s2(i)
  do k=1,m
    if (k==i) then
      J(i,k)=-ds1(i)+ds2(i)
    else
      J(i,k)=-2./(x(k)-x(i))**2
    end if
  end do
end do
end subroutine

```

!-----Subrutina que calcula la inversa -----

```

subroutine invers(dimen,J,invJ)
  IMPLICIT NONE
  integer, intent(in) :: dimen
  complex(16), dimension(dimen,dimn), intent(in) :: J
  complex(16), dimension(dimn,dimn), intent(out) :: invJ
  complex(16) :: x
  integer :: i,k,l
  do i=1,dimn
    do k=1,dimn
      invJ(i,k)=J(i,k)
    end do
  end do
  do 10 i=1,dimn
    x=invJ(i,i)
    invJ(i,i)=CMPLX(1.0,0.0)
    do k=1,dimn
      invJ(k,i)=invJ(k,i)/x
    end do
  do 10 l=1,dimn
    if(l-i) 20,10,20
20  x=invJ(i,l)
    invJ(i,l)=CMPLX(0.0,0.0)
    do k=1,dimn
      invJ(k,l)=invJ(k,l)-invJ(k,i)*x
    end do
10  continue
    return
  end subroutine

```

!-----Subrutina que calcula la norma de un vector complejo -----

```

subroutine norma(dimn,V,magnitud)
  IMPLICIT NONE
  integer, intent(in) :: dimn
  complex(16), dimension(dimn), intent(in) :: V
  real(16), intent(out) :: magnitud
  integer :: i
  real(16) :: magnitud_ant=0.
  magnitud=0.
  do i=1,dimn
    call ordenaysuma((REAL(V(i)))**2,(AIMAG(V(i)))**2,magnitud_ant)
    call ordenaysuma(magnitud,magnitud_ant,magnitud)
  end do
  magnitud=sqrt(magnitud)
  end subroutine

```

!-----Subrutina que transpone una matriz compleja -----

```

subroutine transponer(dren,dcol,A,At)
  IMPLICIT NONE
  integer, intent(in) :: dren,dcol
  complex(16), dimension(dren,dcol), intent(in) :: A(:,:)
  complex(16), dimension(dcol,dren), intent(out) :: At(:,:)
  integer :: i,j
  do i=1,dcol
  do j=1,dren
  At(i,j)=A(j,i)
  end do
  end do
end subroutine

```

!-----Subrutina que conjuga una matriz compleja -----

```

subroutine conjugar(dren,dcol,A,Ac)
  IMPLICIT NONE
  integer, intent(in) :: dren,dcol
  complex(16), dimension(dren,dcol), intent(in) :: A
  complex(16), dimension(dren,dcol), intent(out) :: Ac
  integer :: i,j
  do i=1,dren
  do j=1,dcol
  Ac(i,j)=CONJG(A(i,j))
  end do
  end do
end subroutine

```

!-----Subrutina que multiplica dos matrices complejas AxB -----

!NOTAS:Las sumas no llevan ordenaysuma pues son complejos

```

subroutine mulmatrix(dAr,dAc,dBr,dBc,A,B,C)
  IMPLICIT NONE
  integer, intent(in) :: dAr,dAc,dBr,dBc
  complex(16), dimension(dAr,dAc), intent(in) :: A
  complex(16), dimension(dBr,dBc), intent(in) :: B
  complex(16), dimension(dAr,dBc), intent(out) :: C
  complex(16) :: suma
  integer :: i,j,k
  if(dAc .NE. dBr) then
  write(*,*) ">>Las matrices no tienen la dimension apropiada"
  go to 10
  end if
  do i=1,dAr
  do j=1,dBc
  do k=1,dAc

```

```

        suma=A(i,k)*B(k,j)+suma
    end do
    C(i,j)=suma
    suma=CMPLX(0.0,0.0)
end do
end do
10    end subroutine

!-----Subrutina que llena de ceros una matriz compleja -----
subroutine ceros(dAr,dAc,A)
IMPLICIT NONE
integer, intent(in) :: dAr,dAc
complex(16), dimension(dAr,dAc), intent(out) :: A
integer :: i,j
do i=1,dAr
do j=1,dAc
A(i,j)=CMPLX(0.0,0.0)
end do
end do
end subroutine

!-----Subrutina que ordena y suma dos numeros de menor a mayor -----
subroutine ordenaysuma(a,b,suma)
IMPLICIT NONE
real(16), intent(in) :: a,b
real(16), intent(out) :: suma
if(a .GE. b) then
suma=b+a
else
suma=a+b
end if
end subroutine

!----Subrutina que agrega una epsylon a la componente real(1), imaginaria(2) o ambas(3) de un vector
complejo ---
subroutine perturbacion(E,m,incremento,componente,Ep)
IMPLICIT NONE
integer, intent(in) :: m
real(16), intent(in) :: incremento
integer, intent(in) :: componente
complex(16), dimension(m), intent(in) :: E
complex(16), dimension(m), intent(out) :: Ep
integer :: i
if (componente==1) then
do i=1,m
Ep(i)=E(i)+CMPLX(incremento,0.0)

```

```
end do
else if (componente==2) then
do i=1,m
Ep(i)=E(i)+CMPLX(0.0,(-1)**i*incremento)
end do
else if (componente==3) then
do i=1,m
Ep(i)=E(i)+incremento*CMPLX(1.0,(-1)**i)
end do
end if
end subroutine
```

Referencias

- [Atkins, 2005] P. Atkins y R. Friedman, *Molecular Quantum Mechanics* (Oxford University Press, 2005).
- [Bardeen, 1957] J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer, Theory of Superconductivity, *Physical Review* **108**, 1175 (1957).
- [Bogoliubov, 1958] N. N. Bogoliubov, On a New Method in the Theory of Superconductivity, *Nuovo Cimento* **7**, 794 (1958).
- [Brihuega, 2011] I Brihuega, A. M. García-García, P. Ribeiro, M. M. Ugeda, C. H. Michaelis, S. Bose y K. Kern, Experimental Observation of Thermal Fluctuations in Single Superconducting Pb Nanoparticles through Tunneling Measurements, *Physical Review B* **84**, 104525-1 (2011).
- [Bruus, 2004] H. Bruus y K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction* (Oxford University Press, 2004).
- [Dukelsky, 2012] J. Dukelsky y S. Pittel, Exact Solutions for Pairing Interactions, *World Scientific Review* (2012).
- [Delft, 2000] J. von Delft y F. Braun, Superconductivity in Ultrasmall Grains: Introduction to Richardson's Exact Solution of Discrete Energy Levels in Ultrasmall Metallic Grains, Proceedings of the NATO Advance Study Institute "Quantum Mesoscopic Phenomena and Mesoscopic Devices in Microelectronics", Ed. I.O. Kulik y R. Ellialtioglu, Science Series C **559**, 361-370 (Kluwer Pub., 2000) [arXiv:cond-mat/9911058v1].
- [Delft, 2001] J. von Delft y D. C. Ralph, Spectroscopy of Discrete Energy Levels in Ultrasmall Metallic Grains, *Physics Reports* **345**, 61 (2001).
- [Fetter, 2003] A. Fetter y J. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (Dover Publications, Inc., 2003).
- [Fröhlich, 1950] H. Fröhlich, Theory of the Superconducting State. I. The Ground State at the Absolute Zero of Temperature, *Physical Review* **79**, 845 (1950).
- [Galván, 2013] C. Galván, Superconductividad Anisotrópica en los Formalismos de BCS Generalizado y de Bogoliubov-De Gennes, tesis doctoral presentada en el Posgrado de Ciencias Físicas, UNAM, México (2013).
- [Haken, 1976] H. Haken, *Quantum Field Theory of Solids* (North-Holland Publishing Company, 1976).

- [**Navarro, 2007**] O. Navarro y R. Baquero, *Ideas Fundamentales de la Superconductividad* (Universidad Nacional Autónoma de México, 2007).
- [**Pérez, 2006**] J. S. Millán, L. A. Pérez y C. Wang, **Electronic Specific Heat of s-, p-, and d-wave Superconducting States**, *AIP Conference Proceedings* **850**, 563 (2006).
- [**Pines, 1963**] D. Pines, *Elementary Excitations in Solids* (W.A. Benjamin, Inc. 1963).
- [**Plumhof, 2014**] J. Plumhof, T. Stöferle, L. Mai, U. Scherf y R. Mahrt, **Room-Temperature Bose-Einstein Condensation of Cavity Exciton-Polaritons in a Polymer**, *Nature Materials* **13**, 247 (2014).
- [**Pogosov, 2011**] W. V. Pogosov y M. Combescot, **From one to N Cooper pairs, step by step**, *Physica C* **471**, 566 (2011).
- [**Ramírez, 2012**] C. Ramírez, **Naturaleza Bosónica y Condensación de Pares de Cooper Colectivos**, tesis doctoral presentada en el Posgrado de Ciencias Físicas, UNAM, México (2012).
- [**Ramírez, 2014**] C. Ramírez y C. Wang, **Bose-Einstein Condensation of Collective Electron Pairs**, *Journal of Low Temperature Physics* **175**, 295 (2014).
- [**Richardson, 1963**] R. W. Richardson, **A Restricted Class of Exact Eigenstates of the Pairing-Force Hamiltonian**, *Physics Letters* **3**, 277 (1963).
- [**Richardson, 1964**] R. W. Richardson y M. Sherman, **Exact Eigenstates of the Pairing-Force Hamiltonian**, *Nuclear Physics* **52**, 221 (1964).
- [**Richardson, 1966**] R. W. Richardson, **Numerical Study of the 8-32 Particle Eigenstates of the Pairing Hamiltonian**, *Physics Review* **3**, 141 (1966).
- [**Sierra, 2004**] G. Sierra, J. M. Román y J. Dukelsky, **The Elementary Excitations of the BCS Model in the Canonical Ensemble**, *International Journal of Modern Physics A* **19**, 381 (2004).
- [**Tinkham, 2004**] M. Tinkham, *Introduction to superconductivity* (Dover Publications, Inc., 2004).
- [**Tong, 2006**] D. Tong, **Notas del Curso: Quantum Field Theory**, *Universidad de Cambridge*, Departamento de Matemáticas Aplicadas y Física Teórica (2006).
- [**Valatin, 1958**] J. G. Valatin, **Comments on the Theory of Superconductivity**, *Nuovo Cimento* **7**, 843 (1958).