



Universidad Nacional Autónoma de México
Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales
Instituto de Investigaciones en Materiales

Formalismo del crossover BCS-Bose extendido con pares de Cooper de
huecos para superconductores

T E S I S
que para optar por el grado de
DOCTOR EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

Presenta

Luis Abraham García Hernández

Dr. Manuel de Llano de la Garza
Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM
Director de Tesis

Dra. Marcela Dolores Grether González
Facultad de Ciencias, UNAM
Miembro Comité Tutor

Dr. Gerardo Jorge Vázquez Fonseca
Instituto de Física, UNAM
Miembro Comité Tutor

Ciudad Universitaria, Cd. Mx., diciembre de 2020



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES

FORMALISMO DEL CROSSOVER BCS-BOSE
EXTENDIDO CON PARES DE COOPER DE HUECOS
PARA SUPERCONDUCTORES

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

DOCTOR EN
CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

PRESENTA

LUIS ABRAHAM GARCÍA HERNÁNDEZ

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Manuel de Llano de la Garza

2020

Formalismo del *crossover* BCS-Bose extendido con pares de Cooper de huecos para superconductores

M. en C. Luis Abraham García Hernández

*Dedicado a
mi maestro y amigo,
Dr. Manuel de Llano*

Agradecimientos

Hay muchas personas con las que me siento muy agradecido y en deuda por su amor, su cariño, ayuda y enseñanzas a lo largo de todos estos años en que realicé los estudios de doctorado. No quisiera dejar a ninguno de ustedes fuera de mis pensamientos, porque son los cimientos de mi formación, no sólo como científico, sino también por la persona que hoy me siento dichoso ser.

Quiero primero agradecer a todos mis amigos, tanto los que ya conocía como los que en esta etapa de mi vida he cultivado y con los que he pasado momentos inolvidables dentro y fuera de la Universidad, en las charlas de divulgación y en cada una de las reuniones que hemos hecho con el único fin de ser felices. Me llenan de alegría y entusiasmo la vida y me dan un motivo para seguir todos los días tratando de aprender y descubrir las maravillas de la naturaleza. Ustedes me han aportado mucho y eso les aseguro, está reflejado en este trabajo.

Una parte fundamental para mi formación y aprendizaje han sido mis alumnos de la Facultad de Ciencias. Sin ellos, mi etapa formativa como doctor habría estado incompleta, insípida y no habría tenido la oportunidad de crecer y de transmitir mi pasión por la ciencia y mis deseos por verlos crecer como profesionistas. Si has sido mi alumno te doy las gracias porque tú me enseñaste que la ciencia nunca termina de aprenderse.

Deseo agradecer a mi familia, empezando por mis padres, Berta, José Luis y mi hermana Araceli, nuevamente por haberme dado la vida, por enseñarme a apreciarla como lo más valioso que puedo tener y sembrar la semilla de una persona que debe aportar en beneficio de todos los demás. Sus consejos me han permitido tomar las decisiones por las que me siento orgulloso de ser su hijo.

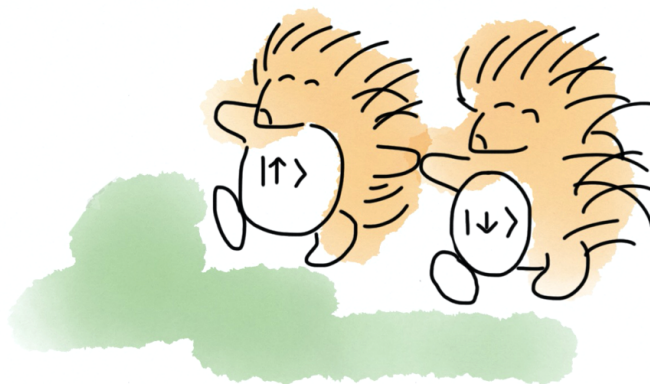
Con un cariño muy especial y con todo el amor que le debo, dedico este agradecimiento para Aránzazu, porque me has mostrado que puedo abrir mis sentimientos a los demás y por ser mi familia. Hemos recorrido un camino hermoso y estoy seguro que contaré contigo el resto de mi vida. Tu cariño inmenso es un pilar en mi persona cada día.

Estaría incurriendo en una falta enorme si no mencionara a los profesores que me tendieron la mano y me dieron la oportunidad de crecer y quienes creyeron en mi tanto académica como personalmente. Con especial dedicación para el Dr. Víctor Velázquez y la Dra. Marcela Grether.

Por último y a quien le dedico este trabajo, a mi tutor, profesor y amigo, el Dr. Manuel de Llano. No tengo palabras suficientes para agradecer su infinita confianza, su continua enseñanza dentro y fuera de la vida académica y por cada uno de los entrañables momentos que pasé con usted. Este camino no habría sido posible sin su apoyo, motivación y consejo. Toda mi vida le estaré infinitamente agradecido.

Finalmente, y con orgullo, a la Universidad Nacional Autónoma de México, su Facultad de Ciencias y su Posgrado; en esta maravillosa casa de estudios ha sido posible dar otro paso más en mi formación como científico.

A todos ustedes, muchas gracias.



Agradezco al CONACyT por la beca de posgrado que se me otorgó para poder realizar mis estudios de doctorado (403765) así como al proyecto de CONACyT-Ciencia Básica de la Dra. Marcela Grether (285894) y al proyecto PAPIIT-DGAPA-UNAM del Dr. Manuel de Llano (IN102417/30) con los que fue posible presentar en foros y encuentros académicos los resultados derivados de este trabajo.

Índice general

1. Introducción	1
2. Superconductividad	3
2.1. Materiales superconductores	3
2.2. Propiedades de los superconductores	5
2.3. Teoría BCS de la superconductividad	8
2.4. Condensación de Bose-Einstein	14
3. Crossover BCS-Bose	17
3.1. Antecedentes	17
3.2. Crossover BCS-Bose	18
3.3. Ecuación de número y del gap para el crossover	20
4. Teoría de la condensación de Bose-Einstein generalizada	23
4.1. Antecedentes	23
4.2. Modelo completo bosón-fermión	24
4.3. Potencial termodinámico	26
4.4. Ecuaciones del GBEC	30
4.5. Casos límite del crossover BCS-Bose extendido	32
4.6. Gap de energía	33
5. Propiedades Termodinámicas	39
5.1. Entropía	39
5.2. Capacidad calorífica	42
Conclusión	47
A. Sobre la construcción de las ecuaciones del GBEC	49
A.1. Relaciones de conmutación y anticonmutación	49
A.2. Diagonalización del hamiltoniano	51
A.3. Eigenestados y eigenvalores	53
B. Códigos implementados para la solución numérica	55
C. Sobre los detalles algebraicos de BCS	65
Bibliografía	67
Índice alfabético	71

Publicaciones

Durante el desarrollo de este trabajo se realizaron una serie de publicaciones en revistas indexadas de revisión por pares de circulación internacional, donde se incluyen los resultados de este trabajo.

En conjunto con el equipo del Dr. Manuel de Llano

- I. Chávez, L.A. García, M. Grether and M. de Llano. Role of superconducting energy gap in extended BCS–Bose crossover theory, *Int. J. Mod. Phys. B* **31**, 1745004 (2017). doi: 10.1142/S0217979217450047
- I. Chávez, L.A. García, M. Grether and M. de Llano. BCS–Bose crossover theory extended with hole Cooper pairs, *Int. J. Mod. Phys. B* **31**, 1745013, (2017). doi: 10.1142/S0217979217450138
- I. Chávez, L.A. García, M. Grether, M. de Llano and V.V. Tolmachev. Extended BCS–Bose crossover, *J. Supercond. Nov. Magn.* **31**, 631 (2018). doi: 10.1007/s10948-017-4383-z
- I. Chávez, L.A. García, M. Grether, M. de Llano and V.V. Tolmachev. Two-Electron and Two-Hole Cooper Pairs in Superconductivity, *J. Supercond. Nov. Magn.* **32**, 1633 (2019). doi: 10.1007/s10948-018-4890-6

Publicación como primer autor

- L.A. García and M. de Llano. Entropy and heat capacity in the generalized Bose-Einstein condensation theory of superconductors, *Int. J. Mod. Phys. B*, **33**, 1950311 (2019). doi: 10.1142/S0217979219503119

Asimismo, se presentó el formalismo y sus resultados en los siguientes foros y encuentros académicos.

Internacional

- Invited Speaker, 12th International Conference on New Theories, Discoveries, Applications of Superconductors and Related Materials (New³SC-12)
L.A. García, I. Chávez, M. Grether and M. de Llano, *Entropy and heat capacity in the generalized Bose-Einstein condensation theory for superconductors*.
Oxford, UK, 2019

Nacionales

- Poster, LVIII Congreso Nacional de Física
L.A. García, I. Chávez, M. Grether, M. de Llano, *Pares de huecos de Cooper usando la BEC generalizada*.
Mérida, Yucatán, 2015
- Presentación Oral, LIX Congreso Nacional de Física
L.A. García, I. Chávez, M. Grether, M. de Llano, *¿De qué se trata el cruce (crossover) BCS-Bose?*
León, Guanajuato, 2016
- Presentación Oral, LX Congreso Nacional de Física
L.A. García, I. Chávez, M. Grether, M. de Llano, *La longitud de dispersión en la generalización del condensado de Bose-Einstein para superconductores*.
Monterrey, Nuevo León, 2017
- Presentación Oral, LXI Congreso Nacional de Física
L.A. García, I. Chávez, M. Grether, M. de Llano, *Brecha de energía y entropía en la teoría de la condensación de Bose-Einstein generalizada para superconductores*.
Puebla, Puebla, 2018

Capítulo 1

Introducción

Desde su descubrimiento hace poco más de 100 años, los superconductores y superfluidos han sorprendido a los científicos e investigadores con una gran cantidad de increíbles fenómenos inesperados. Las teorías que han podido explicar la superconductividad en metales y la superfluidez en ^4He se cuentan entre los grandes logros de la física teórica del siglo XX, los cuáles han tenido profundas implicaciones en otras áreas, como en la construcción del mecanismo de Higgs dentro del Modelo Estándar de las partículas fundamentales.

Actualmente no se presentan signos de que el progreso en estas áreas se detenga. Por ejemplo, en años recientes se ha visto un renovado interés luego de que en 1986 J. G. Bednorz y K. A. Müller descubrieran los cupratos superconductores de alta temperatura crítica [1] y el anuncio en 1995 de la obtención de un condensado de Bose-Einstein en gases atómicos ultra enfriados por parte de W. Ketterle, E. A. Cornell y C. E. Wieman [2,3]. Estos avances han ampliado tremendamente el alcance de la física de muy bajas temperaturas.

Hoy en día se conoce un amplio número de materiales que son superconductores, el campo no se restringe únicamente al estudio de los metales y sus aleaciones, también se incluye el estudio de óxidos, materiales basados en carbón como los fullerenos (C_{60}), compuestos basados en tierras raras y materiales basados en S y Br, citando por ejemplo el MgB_2 que fue descubierto en 2001 [4] o el hidruro de azufre [5,6] que han abierto el camino de superconductores a muy altas temperaturas.

Las aplicaciones tecnológicas de los superconductores están también en constante crecimiento aunque más lentamente. El Gran Colisionador de Hadrones (LHC, por sus siglas en inglés) de la Organización Europea para la Investigación Nuclear (CERN, por sus siglas en francés) en Suiza, mostró en 2012 su potencial en la física de partículas con la observación del bosón de Higgs [7] y sus resultados no habrían sido posibles si no se hubieran implementado los recientes descubrimientos en la tecnología de imanes superconductores. El éxito contundente de estos materiales se dará en novedosas aplicaciones industriales o de investigación, y en definitiva a partir de que se descubra (de ser posible) este fenómeno a temperatura y presiones ambientales [6,8].

Objetivo

La teoría de J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer (BCS) [9] para superconductores (SCs) puede explicar satisfactoriamente algunas de las propiedades de los llamados SCs convencionales y al ser la primera teoría microscópica que pudo explicar este fenómeno utilizando la idea de la formación de los pares de electrones de Cooper con una interacción electrón-fonón, ha merecido todo el reconocimiento por parte de la comunidad científica

por el logro obtenido.

A pesar de la solidez que presenta la teoría BCS, esta no puede explicar todas las características de los superconductores conocidos. Podemos hablar por ejemplo de los superconductores de alta temperatura crítica, cuyas propiedades no pueden explicarse dentro del marco de la teoría BCS. También es conocido el hecho de que algunos materiales llegan al estado SC sólo si son sometidos a presiones gigantescas, típicamente del orden de millones de atmósferas [5, 6], esta característica no es explorada dentro de BCS o alguna otra teoría microscópica de la superconductividad que resulte en una descripción adecuada.

Por esta razón en este trabajo se analiza una teoría relativamente nueva que ofrece una explicación ampliada al fenómeno de la superconductividad. El objetivo de esta tesis es describir a los materiales SCs dentro del formalismo de cruce (*crossover*, en inglés) entre las teorías de BCS y de la condensación de Bose-Einstein (BEC, en inglés), introduciendo la idea de los pares de Cooper de huecos. Se considera la teoría conocida como la condensación de Bose-Einstein generalizada (GBEC, por sus siglas en inglés) y se presenta el *crossover* BCS-Bose extendido con pares de Cooper de huecos. Se calculan las propiedades termodinámicas que caracterizan a los SCs y se comparan con datos experimentales.

Objetivos particulares

Adicionalmente al objetivo principal de este trabajo se abordarán los siguientes puntos como auxiliares que guiarán la forma en que se analicen los resultados obtenidos:

- Entender el vínculo que la teoría BCS tiene con la teoría BEC para desarrollar correctamente el formalismo de cruce entre ambas teorías.
- Introducir el concepto de pares de Cooper de huecos al formalismo como extensión del ya establecido *crossover* BCS-Bose.
- Obtener una descripción de los SCs convencionales con esta teoría ampliada.
- Determinar las propiedades termodinámicas de los SCs y comparar estos resultados con datos experimentales para verificar la validez y alcance de la teoría desarrollada.

Justificación

El modelo del *crossover* BCS-Bose ha presentado fantásticos resultados tanto teóricos [10, 11] como experimentales [12], sin embargo, no se han podido incluir en esta teoría las características de los SCs de alta temperatura crítica, las enormes presiones que dan origen en algunos materiales al estado superconductor o detalles energéticos para vincularlo con la estructura de bandas. En este sentido se busca añadir un elemento al modelo de *crossover* con el objetivo de ampliarlo mediante la inclusión de los pares de Cooper de huecos, con lo que se espera dar nuevos pasos hacia una descripción más detallada de los SCs.

Dentro del *crossover* BCS-Bose se explora la inclusión de la longitud de dispersión de onda s como un parámetro descriptivo complementario. Los primeros resultados satisfactorios al introducir los pares de Cooper de huecos muestran una mejora sustancial en la razón T_c/T_F para SCs convencionales conocidos en la literatura como *bad actors* [13–15].

Capítulo 2

Superconductividad

En este capítulo se presentarán las propiedades fundamentales que poseen los SCs como la resistencia eléctrica nula y el efecto Meissner. Se presenta una breve introducción a las teorías más efectivas que han contribuido al entendimiento del fenómeno de la superconductividad, entre ellas la teoría de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) y se finaliza con el resultado más notable de la condensación de Bose-Einstein.

2.1. Materiales superconductores

La superconductividad es una propiedad física de algunos materiales entre los que destacan los metales y los compuestos metálicos. Un material superconductor (SC) se caracteriza, entre otras cosas, por tener una resistencia eléctrica nula, es decir, ser un conductor perfecto, además de convertirse en un diamagneto perfecto cuando su temperatura disminuye por debajo de un cierto valor llamado la temperatura crítica T_c también conocida como temperatura de transición al estado superconductor la cual depende extensamente del material involucrado.

Para que un material sea considerado un SC debe de poseer estas dos propiedades: si su resistividad se vuelve cero a bajas temperaturas sin ser simultáneamente un diamagneto perfecto, entonces se trata solamente de un conductor ideal. Asimismo, si se convierte en un diamagneto a bajas temperaturas pero su resistencia es aún detectable, por mínimo que sea ese valor, entonces sólo se trata de un diamagneto perfecto.

El fenómeno de la superconductividad fue descubierto en 1911 por H. Kamerlingh-Onnes [16] midiendo resistencias eléctricas extremadamente pequeñas en mercurio (Hg) por debajo de una temperatura $T_c \simeq 4.2$ K (*cf.* Fig. 2.1). En general, los SCs elementales conocidos sufren la transición a este estado a temperaturas muy bajas. De esos elementos el niobio (Nb) tiene la temperatura crítica más alta con $T_c \simeq 9.2$ K a presión atmosférica. Es interesante que mientras algunos materiales comunes como el

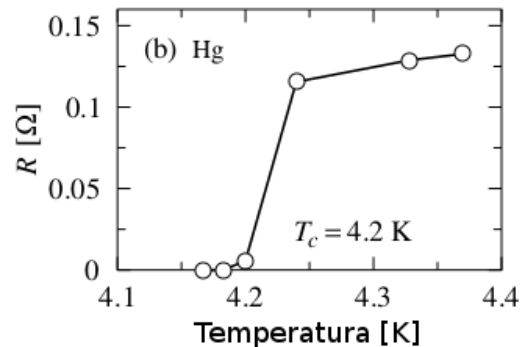


Figura 2.1: Resistencia como función de la temperatura para el mercurio. La caída precipitada de la resistencia en $\simeq 4.2$ K indica el inicio de la superconductividad. Gráfica realizada con datos de H.K. Onnes [16].

aluminio (Al) ($T_c \simeq 1.2$ K), el estaño (Sn) ($T_c \simeq 3.7$ K) y el plomo (Pb) ($T_c \simeq 7.2$ K) son SCs bien conocidos, otros materiales conductores cuya conductividad eléctrica es muy alta bajo condiciones ordinarias, como el cobre (Cu), la plata (Ag) y el oro (Au), no se ha observado evidencia experimental de que en alguna condición pasen al estado superconductor. Es tema de debate si estos materiales se convertirán eventualmente en SCs si se aumenta su pureza o se enfrían a temperaturas aún más bajas.

Se ha encontrado que 53 elementos son SCs llamados elementales, 30 de ellos lo son a presión atmosférica, mientras que el resto lo son a presiones muy altas de hasta millones de atmósferas. En la Figura 2.2 se muestran los elementos que se han observado en el estado superconductor.

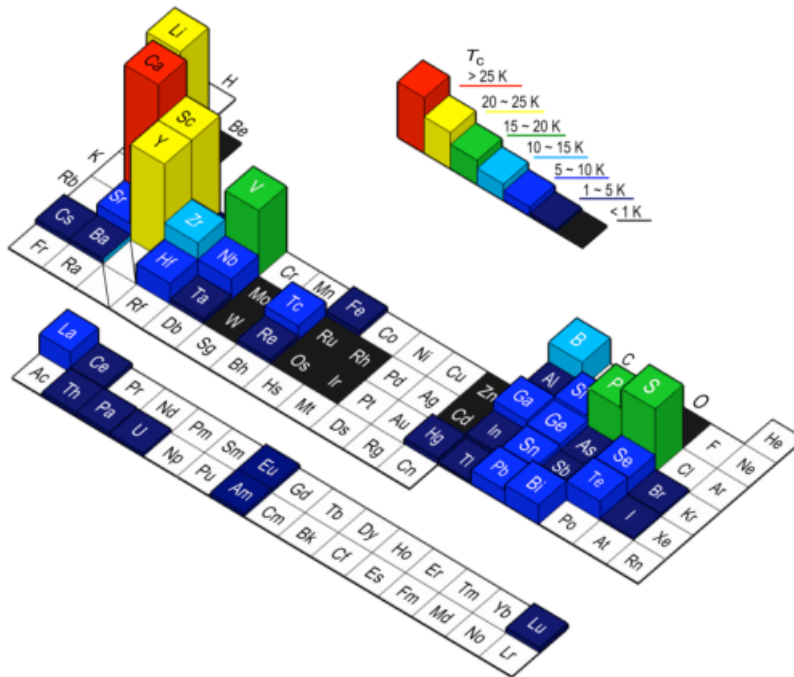


Figura 2.2: Elementos que exhiben superconductividad y su temperatura de transición. Imagen tomada de Sakata *et al.* [17].

Desde su descubrimiento por Kamerlingh-Onnes y durante los siguientes 75 años la superconductividad se presentaba solamente en metales puros a temperaturas comparadas con la del helio (He) líquido, del orden de 4.2 K y una variedad de aleaciones fueron encontradas a temperaturas relativamente elevadas. Sin embargo, ninguna de ellas superaba los 23.2 K en el compuesto Nb_3Ge (vea la Figura 2.3).

Después de este largo periodo sin encontrar una temperatura de transición más elevada, Bednorz y Müller [1] descubrieron en 1986 que los compuestos de óxido de cobre como el $La_{2-x}Ba_xCu_2O_4$ (perovskitas cerámicas) pueden ser SCs a temperaturas más altas, contándose entre estos el $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ con una temperatura crítica $T_c \simeq 93$ K. Inmediatamente después del trabajo de Bednorz y Müller varios cupratos fueron descubiertos con temperaturas críticas récord. Debido a que estas temperaturas eran mucho más altas que las descubiertas antes del año 1986, estos SCs son referidos ahora como superconductores

de alta T_c mientras que los anteriores se consideran como los SCs convencionales.

Hasta hace unos años, el récord de la temperatura crítica más alta lo tenía el compuesto $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ con $T_c \simeq 138$ K a presión ambiental mientras que bajo una presión de aproximadamente 30 millones de atmósferas su T_c puede aumentar hasta 165 K. El material con la temperatura crítica más alta registrada fue obtenida en 2015 en un sistema de H_2S altamente comprimido ($\simeq 155$ GPa) con un valor de $T_c \simeq 203$ K [5].

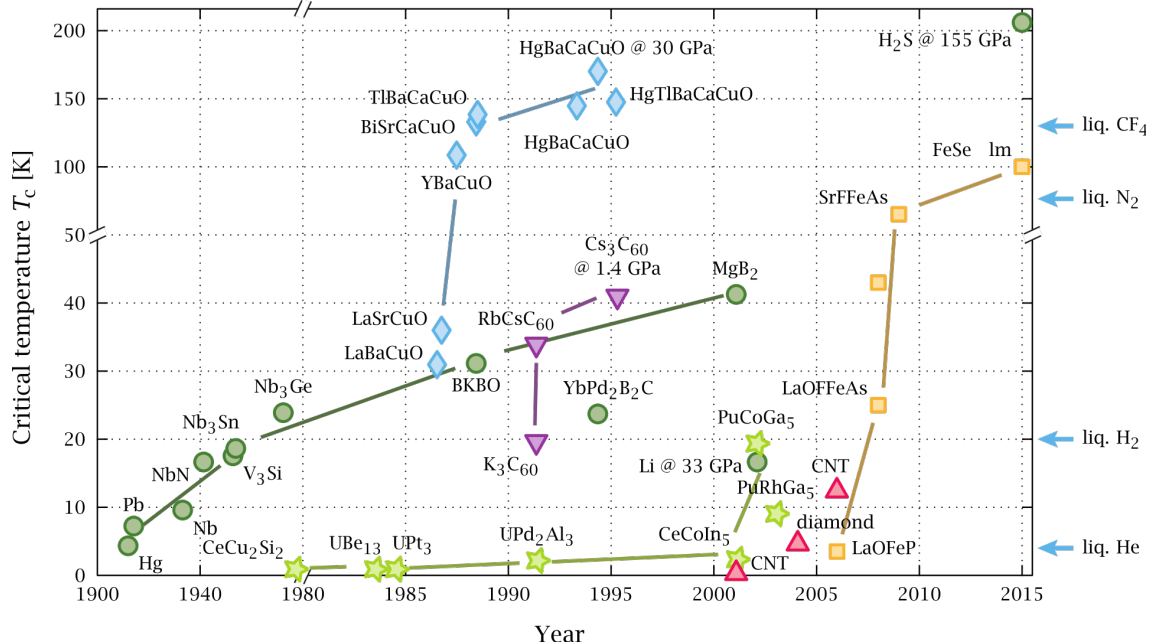


Figura 2.3: Línea temporal de los superconductores. Los SCs de BCS se muestran como círculos verdes, los cupratos (de alta T_c) como diamantes azules y los SCs con una base de hierro como cuadrados amarillos. Imagen tomada de Wikipedia, high-temperature superconductivity.

2.2. Propiedades de los superconductores

Hasta ahora se han considerado sólo dos de las propiedades fundamentales de un SC, la resistencia eléctrica nula y el diamagnetismo perfecto. Existen otras propiedades físicas que son radicalmente diferentes por debajo de la T_c con respecto de su manifestación por encima de esta temperatura. Se dice que un SC se encuentra en una fase superconductor o estado superconductor si estas propiedades específicas se presentan por debajo de la T_c mientras que la fase por encima de T_c es conocida como la fase normal o el estado normal. Todos los estudios experimentales y teóricos han mostrado que la fase superconductor es un estado de equilibrio termodinámico. Así, la termodinámica en conjunto con la física estadística pueden utilizarse para describir este estado de la materia.

Se ha establecido que el diamagnetismo perfecto es una de las propiedades fundamentales de un SC. Esto implica que un SC (llamado de tipo I) repele completamente el campo

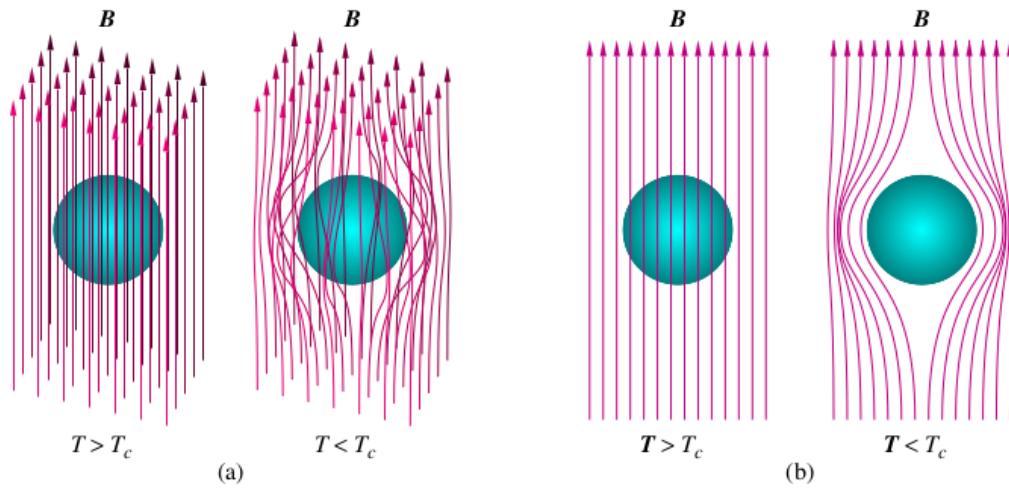


Figura 2.4: Ilustración esquemática del efecto Meissner para un SC de tipo I. La esfera representa un SC y las flechas las líneas del campo magnético \mathbf{B} . (a) Vista tridimensional y (b) vista lateral. Imagen tomada de Han [18].

magnético de su interior cuando se encuentra en la fase superconductora. Éste es el llamado efecto Meissner-Ochsenfeld, descubierto en el año de 1933 [19] (*cf.* Fig. 2.4). De hecho, no es del todo cierto que el campo magnético se encuentre completamente fuera del SC; experimentos más refinados y un análisis más detallado [20] revelaron que parte del campo magnético penetra el superconductor en una porción muy delgada a partir de su frontera caracterizada con una profundidad de penetración λ que es del orden de 0.5 nm en la mayoría de los SCs a bajas temperaturas –conocidos como SCs tipo II. Aunque el campo magnético puede entrar una distancia pequeña dentro del SC no lo podrá hacer al resto del material y así se mantiene como un diamagneto perfecto (*cf.* Fig. 2.5).

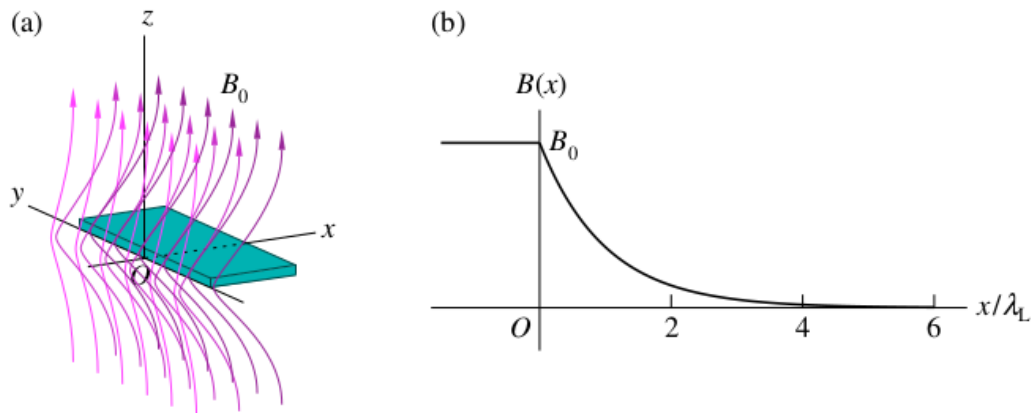


Figura 2.5: Penetración del campo magnético en una placa superconductora muy delgada. (a) Placa en el plano xOy y el campo magnético dado por $\mathbf{B} = B_0 \hat{\mathbf{k}}$. (b) Variación del campo magnético con la distancia x en la placa desde su superficie. Imagen tomada de Han [18].

Si el campo magnético es reducido lentamente hasta cero, parte de las líneas de flujo magnético pueden quedar atrapadas dentro del material superconductor. Se encuentra que el momento magnético generado se mantiene por una supercorriente que prácticamente nunca decae fluyendo alrededor del material. Experimentos más detallados [21, 22] mostraron que el flujo del campo magnético atrapado en el material está cuantizado como $\Phi = n\Phi_0$, donde $\Phi_0 = h/2e$ es el cuanto de flujo magnético de pares de cargas eléctricas.

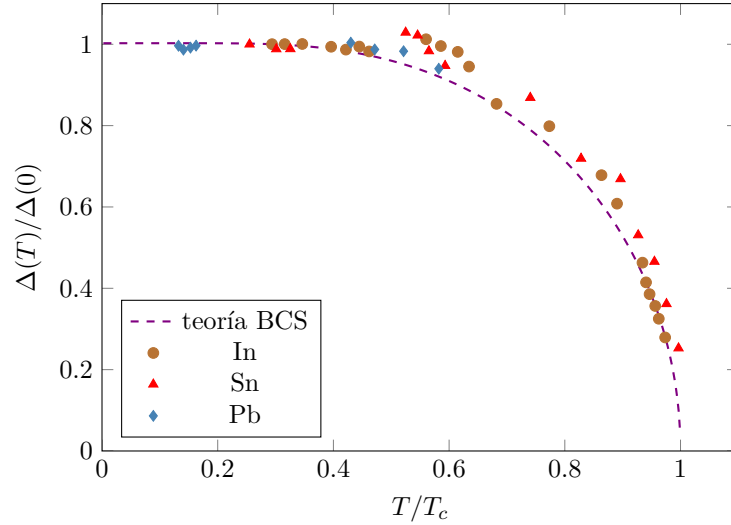


Figura 2.6: *Gap* de energía normalizado con $\Delta(0)$ como función de la temperatura T/T_c . Se presentan los resultados con experimentos de tunelamiento de electrones para In, Sn y Pb [23].

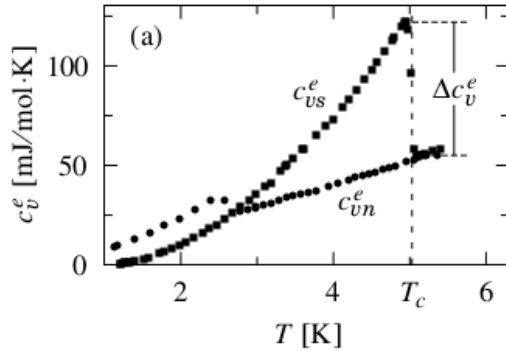


Figura 2.7: Calor electrónico específico del vanadio en las fases normal (n) y superconductora (s) en función de la temperatura. Los cuadrados representan datos con campo magnético cero y los círculos con un campo magnético de 0.3 T. Gráfica realizada con datos de Corak *et al.* [24].

Si una banda continua de la energía de excitación es separada por una brecha finita E_g a partir del nivel energético del estado base, se encuentra que esta brecha es dependiente de la temperatura. La brecha de energía (o *gap* en inglés) $\Delta(T)$ es cero en $T = T_c$ y llega a un valor máximo $\Delta(0)$ cuando la temperatura de acerca a 0 K. La dependencia en la temperatura del *gap* de energía se muestra en la Figura 2.6. Esta propiedad es tal vez una de las más importantes porque permite conocer con más detalle la dependencia de la temperatura de un material SC.

La termodinámica estudia las transiciones de fase de la materia y la transición al estado superconductor es un tipo especial de transición de fase. Para un superconduc-

tor como el vanadio (V) existe un salto en la capacidad calorífica y el cambio de fase es de segundo orden, es decir, no hay calor latente (*cf.* Fig. 2.7). Las dos anteriores son ejemplos de las propiedades termodinámicas que son esenciales conocer para describir el comportamiento de los SCs y clasificarlos dependiendo del mecanismo que se adapte a estas características empíricas. En este trabajo se discutirán las propiedades termodinámicas tales como la entropía y la capacidad calorífica. Para determinarlas es necesario contar con una teoría que permita calcularlas a partir de hipótesis microscópicas junto con la fenomenología de sus componentes para después comparar esos resultados con datos experimentales.

2.3. Teoría BCS de la superconductividad

Antes de que se estableciera una teoría microscópica de la superconductividad, varias teorías fenomenológicas fueron propuestas para tomar en cuenta las propiedades empíricas de los SCs. Algunas de ellas son aún de gran valor tanto científico como tecnológico. Destacan la teoría de dos fluidos de 1934 propuesta por C. J. Gorter y H. Casimir [25] donde la idea básica es dividir a los electrones dentro de la fase superconductor en dos categorías: electrones normales y electrones superconductores.

Una teoría fenomenológica que toma en cuenta la electrodinámica de los SCs convencionales es la propuesta por los hermanos London en 1935 [26], consiste en dos ecuaciones conocidas como las ecuaciones de London. Su triunfo más grande radica en que pueden ser utilizadas para describir correctamente el efecto Meissner-Ochsenfeld.

De igual manera se puede mencionar la teoría fenomenológica de las ecuaciones de Ginzburg-Landau propuestas en 1950 [27] para estudiar las propiedades macroscópicas de un superconductor usando el método desarrollado en la teoría de Landau de las transiciones de fase continuas [28]. De acuerdo con V. L. Ginzburg y L. D. Landau, la transición de fase superconductor puede ser descrita con un parámetro de orden $\psi(\mathbf{r})$. Por ejemplo, la densidad del número de los electrones superconductores n_s de la teoría de dos fluidos puede escribirse como $n_s = |\psi(\mathbf{r})|^2$.

La teoría de BCS es una descripción de física estadística cuántica para la superconductividad propuesta por J. Bardeen, L. N. Cooper y R. Schrieffer en 1957 [9] para SCs convencionales. De acuerdo con BCS, la superconductividad es un efecto cuántico macroscópico causado por la condensación de pares de Cooper de electrones en el estado base superconductor. Actualmente, la teoría de BCS junto con la teoría de acoplamiento fuerte de G. M. Eliashberg [29] son las únicas teorías microscópicas exitosas que se tienen para describir cómo es que ocurre la superconductividad en SCs convencionales. Sin embargo, existen varios SCs llamados exóticos [30] y de alta T_c con propiedades anómalas que no pueden ser completamente explicadas en el marco de estas teorías.

Los pares de Cooper de electrones

Antes que la teoría BCS fuera formulada, L. N. Cooper [31] resolvió el problema de dos electrones adicionales fuera de la esfera de Fermi la cual se encuentra completamente llena

con los demás electrones (en el espacio recíproco) a temperatura cero. Esto es conocido como el **problema de Cooper**. Supone que la estructura cristalina y la estructura electrónica de bandas no afectan las propiedades cualitativas del estado base superconductor. Supone también la interacción de dos electrones de espín opuesto que se mueven dentro de un gas de electrones que llena la esfera de Fermi con radio k_F (número de onda de Fermi) y se ignoran las interacciones entre los que llenan la esfera de Fermi los cuales ocupan estados conforme lo exige el principio de exclusión de Pauli.

Estos electrones pueden formar una pareja estable incluso cuando la interacción atractiva entre ellos es muy débil. Obtiene la ecuación

$$V \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\epsilon_{\mathbf{k}} - E} = 1 \quad (2.1)$$

donde V es la intensidad de la interacción, E es la energía del sistema y $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$. Puede resolverse de forma aproximada sustituyendo la suma por una integral, quedando

$$1 \simeq N(0)V \log \left(1 - \frac{2\hbar\omega_D}{E - 2E_F} \right) \quad (2.2)$$

donde $N(0)$ es la densidad de estados de electrones a temperatura cero, $\hbar\omega_D$ la energía de Debye y E_F es la energía de Fermi. Se obtiene a su vez

$$E - 2E_F \simeq -2\hbar\omega_D e^{-1/N(0)V}. \quad (2.3)$$

Al encontrarse la interacción V en el denominador del exponente se llega a la conclusión de que este resultado no podría obtenerse a partir de un método perturbativo por tratarse de una singularidad esencial. Como siempre se cumple que $E - 2E_F < 0$, es decir, $E < 2E_F$, entonces el estado del sistema de dos electrones por encima de la superficie de Fermi tiene un valor inferior que la suma de las energías de dos estados de un sólo electrón aislado. Por tanto, los dos electrones han formado un estado ligado conocido como el **par de Cooper de electrones (2eCP)** que siempre se presentará sin importar cuán débil sea la interacción. La formación de los 2eCPs es el ingrediente fundamental de la teoría BCS y la condensación de estos pares da lugar a la superconductividad.

Teoría de BCS

En su trabajo trascendental, Bardeen, Cooper y Schrieffer suponen que la interacción atractiva entre dos electrones del par de Cooper es mediada por la vibración de los átomos, es decir, los electrones forman pares por el intercambio entre sí de **fonones**. Se puede pensar la interacción entre los electrones de la red imaginando que un electrón distorsiona la red de iones alrededor de él. Cuando otro electrón se mueve cerca de la región de la red distorsionada, la energía potencial de la red que siente es diferente que la de la región de la red sin distorsionar. La diferencia en la energía potencial de la red podría ser menor que cero bajo ciertas condiciones, en cuyo caso parecería que existe una interacción atractiva entre los dos electrones. Se puede mostrar que para el estado de energía más bajo los electrones

forman pares tales que su momento angular total es cero, es decir, sólo se consideran electrones apareados con $\mathbf{k} \uparrow$ y $-\mathbf{k} \downarrow$ [32].

Adicionalmente se puede suponer una interacción atractiva dada por

$$V_{\mathbf{k}', -\mathbf{k}} = \begin{cases} -V, & E_F - \hbar\omega_D < \epsilon_{\mathbf{k}}, \epsilon_{\mathbf{k}'} < E_F + \hbar\omega_D \\ 0, & \text{de otra manera.} \end{cases} \quad (2.4)$$

El hamiltoniano de interacción atractiva para dos cuerpos mediada por fonones se expresa como

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = -\frac{1}{2}V \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}\sigma\sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'+\mathbf{K},\sigma'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}+\mathbf{K},\sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.5)$$

donde \mathbf{K} es un nuevo índice mudo para la suma que se relacionará con el vector de momento del centro de masa, σ es el valor del espín (note que se consideran espines distintos) y \hat{a}^\dagger, \hat{a} son los operadores de creación y aniquilación de electrones, respectivamente. Asimismo, la suma se realiza sobre los estados de un sólo electrón \mathbf{k} y \mathbf{k}' que se encuentren dentro del cascarón de grosor $2\hbar\omega_D$ alrededor de la superficie de Fermi según se definió en (2.4).

Tomando en consideración la energía cinética el hamiltoniano no perturbado es

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.6)$$

donde μ es el potencial químico. Se construye el hamiltoniano para electrones

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} \\ &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{1}{2}V \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{K}\sigma\sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}'\sigma}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'+\mathbf{K},\sigma'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}+\mathbf{K},\sigma'} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

En su trabajo original, Bardeen, Cooper y Schrieffer realizaron un cálculo variacional con el hamiltoniano (2.7) para $\mathbf{K} = 0$ usando como estado base superconductor a

$$|\Omega\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) |0\rangle \quad (2.8)$$

donde $u_{\mathbf{k}}$ es la amplitud de probabilidad para que el estado $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$ *no* se encuentre ocupado y $v_{\mathbf{k}}$ es la amplitud de probabilidad para que el estado $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$ *sí* se encuentre ocupado, cumpliendo la relación $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$.

Diagonalización del hamiltoniano

De manera alternativa al método variacional se puede aplicar un método desarrollado por N. N. Bogoliubov [33]. La idea básica de Bogoliubov es diagonalizar aproximadamente el hamiltoniano (2.7) para obtener información sobre el estado base SC y la temperatura crítica así como las excitaciones por encima del estado base.

Se trata de una aproximación de campo medio que se implementa al introducir un promedio *anómalo* del producto de dos operadores de aniquilación de electrones [18], definido por

$$\Delta = V \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle. \quad (2.9)$$

Aquí el promedio puede tomarse como un promedio en el estado base SC o como un promedio termodinámico, dependiendo de si el cálculo se realiza a temperatura cero o a temperaturas finitas.

A partir del problema de Cooper se supone que el apareamiento tiene lugar entre electrones de espín opuesto. Se asume además que este apareamiento se realiza con momento del centro de masa igual a cero. Así, se puede reducir el hamiltoniano de interacción al dejar únicamente los términos con $\mathbf{K} = 0$, $\sigma = \uparrow$ y $\sigma' = \downarrow$ obteniendo

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}} &= \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}.\end{aligned}\quad (2.10)$$

Para avanzar en este problema se necesita diagonalizar el hamiltoniano mediante una transformación de Bogoliubov. La esencia de esta transformación es encontrar combinaciones lineales de los operadores que aparecen en el hamiltoniano para que sea diagonal en términos de estas combinaciones lineales bajo la premisa de que se preservan las propiedades algebraicas de los operadores iniciales. La forma general de esas combinaciones lineales puede ser deducida utilizando la ecuación de Heisenberg

$$i\hbar \frac{d\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}}{dt} = [\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}, \hat{\mathcal{H}}] = \xi_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} - \Delta \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (2.11)$$

donde $\xi_{\mathbf{k}} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. Se puede mostrar (vea el Apéndice C) que la transformación es

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger &= v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\end{aligned}\quad (2.12)$$

con $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ que satisfacen la condición

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (2.13)$$

Las transformaciones en (2.12) se conocen como las transformaciones de Bogoliubov para fermiones. Con los nuevos operadores $\hat{\alpha}, \hat{\beta}$ el hamiltoniano será

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_{\text{BCS}} &= \sum_{\mathbf{k}} \left\{ [\xi_{\mathbf{k}} (|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2) + \Delta^* u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \Delta u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}] (\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}}) \right. \\ &\quad \left. + (2\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \Delta v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta^* u_{\mathbf{k}}^2) \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + (2\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^* + \Delta^* v_{\mathbf{k}}^{*2} - \Delta u_{\mathbf{k}}^2) \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \right\} \\ &\quad + \sum_{\mathbf{k}} (2\xi_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 - \Delta^* u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* - \Delta u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{V} |\Delta|^2.\end{aligned}\quad (2.14)$$

Note que los términos en la primera línea están en forma diagonal mientras que los términos en la segunda línea son mutuamente hermitianos y los de la tercera línea son solamente constantes. Para diagonalizar $\hat{\mathcal{H}}_{\text{BCS}}$ se requiere que el coeficiente de $\hat{\beta}_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ se anule, concretamente

$$2\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \Delta v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta^* u_{\mathbf{k}}^2 = 0. \quad (2.15)$$

Se debe asumir que $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ son reales con lo cual también Δ es real. Al resolver (2.13) y (2.15) para $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ se obtiene

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}}, \quad (2.16)$$

donde se ha definido el valor de la energía

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}. \quad (2.17)$$

Asimismo queda diagonalizado el hamiltoniano como

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} + \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}}) + E_s \quad (2.18)$$

donde E_s es

$$E_s = 2 \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{V} |\Delta|^2. \quad (2.19)$$

Es claro que $E_{\mathbf{k}}$ es la energía de excitación.

Ecuación del gap de energía

De la energía de excitación en (2.17) se observa que contiene un término que se considera una brecha en la energía de excitación. Esta cantidad energética se utiliza para determinar el estado superconductor y depende de la temperatura. La ecuación para la brecha (*gap* en inglés) de energía se obtiene evaluando el promedio de la energía superconductor (2.9). Haciendo uso de las transformaciones de Bogoliubov (2.12) para expresar $\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}$ y $\hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}$ en términos de $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ y $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}$ se llega a la ecuación para el gap de energía superconductor

$$\Delta(T) = V \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta(T)}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \right) \quad (2.20)$$

donde se ha utilizado el hecho de que las partículas descritas por los operadores $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ y $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}$ son fermiones y por tanto obedecen la estadística de Fermi-Dirac

$$\langle \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{e^{E_{\mathbf{k}}/k_B T} + 1}. \quad (2.21)$$

A partir de la ecuación (2.20) se obtiene el *gap* de energía a temperatura cero, la temperatura crítica superconductor y la dependencia en la temperatura del *gap* de energía superconductor.

Tomando el límite $T \rightarrow 0$ en (2.20) se obtiene

$$1 = V \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta(0)^2}} \quad (2.22)$$

donde $\Delta(0)$ es el gap de energía a temperatura cero. Al convertir la suma sobre \mathbf{k} en una integral para la energía de los electrones y resolviendo para $\Delta(0)$ se obtiene el gap de energía superconductor a temperatura cero

$$\Delta(0) \simeq 2\hbar\omega_D e^{-1/\lambda} \quad (2.23)$$

donde se denota $\lambda = N(0)V$ como la constante de acoplamiento efectiva y $N(0)$ es la densidad de estados electrónicos a $T = 0$.

Se calcula la temperatura crítica T_c a partir de (2.20). En $T = T_c$, $\Delta = 0$ y se cancela en ambos lados de (2.20). Al convertir la suma sobre \mathbf{k} en una integral de la energía ξ con el cambio de variable $x = \xi/2k_B T_c$ se obtiene

$$1 = N(0)V \int_0^{\hbar\omega_D/2k_B T_c} \frac{\tanh x}{x} dx. \quad (2.24)$$

La ecuación para T_c es entonces

$$k_B T_c = \frac{2e^\gamma}{\pi} \hbar\omega_D e^{-1/N(0)V} \simeq 1.134 \hbar\omega_D e^{-1/N(0)V} \quad (2.25)$$

donde $\gamma = 0.577215\dots$ es la constante de Euler. Haciendo uso del resultado del valor del *gap* de la energía (2.23), se obtiene la razón del gap a T_c

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} = \frac{2\pi}{e^\gamma} \simeq 3.53. \quad (2.26)$$

Este valor corresponde a SCs con acoplamiento débil para los que $N(0)V \ll 1$ mientras que los SCs con acoplamiento fuerte normalmente tienen valores grandes de $2\Delta(0)/k_B T_c$.

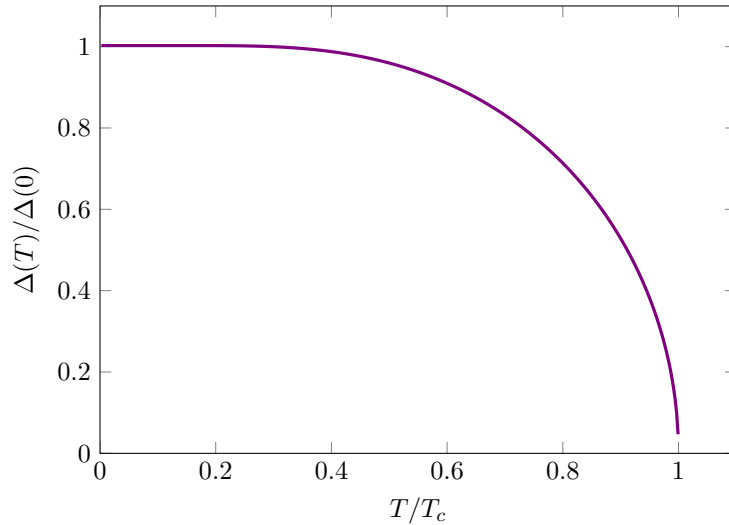


Figura 2.8: *Gap* de energía como función de la temperatura en la teoría de BCS. Se presenta la solución numérica de (2.27). El código puede consultarse en el Apéndice B.

El *gap* de energía a temperatura cero $\Delta(0)$ se calcula utilizando (2.23). Sin embargo, también es posible evaluar el *gap* de energía para temperaturas entre cero y T_c . Para estas temperaturas la solución de (2.22) se obtiene numéricamente convirtiendo la suma sobre \mathbf{k} en una integral de la energía de los electrones

$$\frac{1}{N(0)V} = \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}}{2k_B T}\right). \quad (2.27)$$

La solución de esta ecuación para $\Delta(T)/\Delta(0)$ como función de T/T_c se muestra en la Fig. 2.8.

2.4. Condensación de Bose-Einstein

Siguiendo el argumento original de S.N. Bose de 1924 y de A. Einstein en 1925, en un gas de bosones sin interacciones y sin espín existe una temperatura T_c por debajo de la cual un número macroscópico de partículas ocuparán el estado de energía más bajo de una sola partícula [34].

A diferencia del gas ideal clásico, o del gas de Fermi, el gas ideal de Bose presenta una transición de fase termodinámica conocida como **condensación de Bose-Einstein**. La transición de fase es guiada por la estadística de las partículas y no sus interacciones. En la transición de fase todos los observables termodinámicos tendrán un cambio abrupto en sus características, esto define su **temperatura crítica** T_c . Por debajo de la temperatura crítica en la BEC las partículas del gas normal coexisten en equilibrio con las partículas del gas condensado. Pero a diferencia de una pequeña gotita formada por condensación de un gas, aquí las partículas condensadas no están separadas de las partículas normales en el espacio, sino que se encuentran separadas en el espacio de momentos. Todas las partículas condensadas ocupan un sólo estado cuántico de momento cero, mientras que las partículas normales tienen momento finito.

Usando la estadística de Bose-Einstein el número total de partículas N en un espacio de volumen V es

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/k_B T} - 1}.$$

En el límite termodinámico, los posibles valores de \mathbf{k} se convierten en un continuo y se puede reemplazar la suma por una integral obteniendo $N = \frac{V}{2\pi^3} \int (\exp((\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/k_B T) - 1)^{-1} d^3k$ y así la densidad de partículas $n = N/V$ queda

$$n = \frac{1}{2\pi^3} \int \frac{1}{e^{(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)/k_B T} - 1} d^3k$$

o en términos de la densidad de estados $g(\epsilon) = m^{3/2} \sqrt{\epsilon} / (\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3)$

$$n = \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)/k_B T} - 1} g(\epsilon) d\epsilon.$$

Reescribiendo la integral anterior en términos de la fugacidad $z = \exp(\mu/k_B T)$ se obtiene

$$n = \frac{(mk_B T)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}} \sqrt{x} dx.$$

Para calcular la integral se realiza la expansión de

$$\frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}} = ze^{-x} (1 + ze^{-x} + z^2 e^{-2x} + \dots) = \sum_{p=1}^{\infty} z^p e^{-px}.$$

Esta expansión converge puesto que $z \ll 1$. Colocando este resultado en la integral tenemos

$$\sum_{p=1}^{\infty} z^p \int_0^\infty e^{-px} x^{1/2} dx = \sum_{p=1}^{\infty} z^p \frac{1}{p^{3/2}} \int_0^\infty e^{-y} y^{1/2} dy = \sum_{p=1}^{\infty} z^p \frac{1}{p^{3/2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2},$$

donde se ha utilizado el valor de la integral que es un caso de la función $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$. Combinando los valores constantes, la densidad de las partículas es una función de la fugacidad dada por

$$n = \left(\frac{mk_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} g_{3/2}(z), \quad (2.28)$$

donde la función $g_{3/2}(z)$ es definida por la serie $g_{3/2}(z) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{z^p}{p^{3/2}}$. Se puede mostrar que si $z = 1$ la serie converge y se tiene la función zeta de Riemann $g_{3/2}(1) = \zeta(3/2) \simeq 2.612$, cuyo valor se utilizará a continuación.

Se puede pensar que el resultado de (2.28) es que la fugacidad z y por lo tanto el potencial químico μ se determinan por

$$g_{3/2}(e^{\mu/k_B T}) = \left(\frac{2\pi \hbar^2}{mk_B T} \right)^{3/2} n \quad (2.29)$$

Si nos encontramos en el régimen de muy altas temperaturas y una baja densidad n , el lado derecho de esta ecuación es muy pequeño y se puede utilizar la expansión para z de la forma $g_{3/2}(z) \approx z + \dots$ para obtener

$$\mu \approx -\frac{3}{2} k_B T \ln \left(\frac{mk_B T}{2\pi \hbar^2 n^{2/3}} \right).$$

que nos da el valor del potencial químico μ .

De cualquier forma, conforme se enfría el gas a temperaturas más bajas, el valor de z gradualmente incrementa hasta que eventualmente es igual a 1. En este punto el potencial químico se vuelve cero. Sustituyendo estos valores en (2.29) se obtiene la temperatura a la que este proceso pasa (para un valor fijo de la densidad n) define la temperatura crítica T_c

$$T_c = \frac{2\pi \hbar^2}{mk_B} \left(\frac{n}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3} \quad (2.30)$$

conocida como la temperatura de condensación de Bose-Einstein.

La idea de que la superconductividad ocurra como una transición de fase tipo Bose-Einstein de bosones tuvo un gran impulso con el descubrimiento de los cupratos superconductores de longitud de coherencia corta, o sea, pares bien separados entre sí. R. Friedberg y T. D. Lee [35] lograron ajustes de los datos de cupratos de Y. J. Uemura [30] con una condensación de tipo Bose-Einstein en dos y más dimensiones asumiendo una masa efectiva de los portadores en la dirección perpendicular a los planos de óxido de cobre, como por ejemplo en $Tl_2Ba_2CaCu_2O_x$ [36]. Alexandrov y N. Mott [37] se enfocaron en los bipolarones y notaron una similitud notable entre al menos dos cupratos superconductores y el 4He líquido en cuanto a la singularidad de su calor específico empírico al sobrepasar la T_c .

Basado en el trabajo pionero de D. M. Eagles [38], A. J. Leggett [39] y posteriormente M. Randeria *et al.* [40], formularon el problema para varios fermiones en dos dimensiones (2D) a temperatura cero dentro del formalismo de BCS resolviendo simultánea y autoconsistentemente una ecuación para la densidad del número de partículas y una para la brecha energética, pero sin referencia explícita a una interacción potencial entre dos fermiones relacionada a bajas energías con la longitud de dispersión de onda s .

El problema de BCS-Bose en tres dimensiones (3D) fue analizado extensamente por P. Nozières y S. Schmitt-Rink [41] justo antes del descubrimiento en 1986 de los cupratos superconductores de alta T_c [1]. Su formulación definitiva se muestra en el trabajo de R. Haussmann [42] acentuando la importancia vital de una triple consistencia (*viz.*, la ecuación del *gap*, la de número y la de energía para una sola partícula) y lleva a una temperatura de transición T_c de superfluido que incrementa suave y monótonicamente del extremo de acoplamiento débil (BCS) al acoplamiento fuerte (condensación de Bose-Einstein) donde se recuperan como casos límites la fórmula para la T_c de BCS (expresada en términos de la longitud de dispersión de onda s) y la célebre fórmula de temperatura de condensación de Bose-Einstein (2.28).

Capítulo 3

Crossover BCS-Bose

En este capítulo se presenta la teoría del *crossover* BCS-Bose, la cual describe un gas de partículas fermiónicas que se condensan formando bosones y se obtienen como casos límite las descripciones que establecen la teoría BCS de la superconductividad y la de Bose-Einstein para la condensación de partículas bosónicas.

3.1. Antecedentes

Existen dos formalismos bien conocidos para entender el fenómeno de la superconductividad y la superfluidez¹:

- I. La teoría de Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) [9] que considera a la materia en su estado normal como un gas degenerado de Fermi, el cual sufre una transición de fase a una temperatura T_c . La formación de los pares de Cooper y su condensación (que es la ocupación macroscópica de un sólo estado cuántico) comienzan simultáneamente en la temperatura crítica.
- II. La condensación de bosones descrita por la estadística de Bose-Einstein a la temperatura T_c en la que, por ejemplo átomos de ^4He que son objetos compuestos por un número par de fermiones comienzan a formarse desde temperaturas relativamente altas, considerados como bosones preformados. Al llegar a la temperatura de transición se condensan sufriendo un cambio de estado caracterizado por la ocupación de un sólo estado cuántico.

En la mayoría de los casos de interés experimental el sistema bajo consideración es explicado adecuadamente sólo por una de las teorías mencionadas anteriormente. Por ejemplo, el ^3He forma un superfluido de Fermi descrito por (I), mientras que el ^4He forma un superfluido de Bose (II). Esencialmente todos los tipos de superconductividad en metales y sus compuestos que se entienden razonablemente bien son mucho más cercanos a (I) que a (II). Sin embargo, es de gran interés considerar modelos que se interpolen entre estos dos extremos: el límite de interacción débil y alta densidad es razonablemente descrito por la teoría de BCS mientras que el límite de acoplamiento fuerte y baja densidad consiste de bosones acoplados. Un estudio profundo del cruce o *crossover* en inglés, de ambas teorías

¹La superfluidez es un estado de la materia caracterizado por la ausencia total de viscosidad de manera que en un circuito cerrado, un material con esta propiedad fluiría interminablemente sin fricción [34]. Las características inusuales del He líquido por ejemplo, son explicadas por la teoría de los superfluidos.

resulta en un entendimiento más completo del fenómeno de la superconductividad, incluso para sistemas que son claramente cercanos a alguno de estos dos límites. Es más, existen sistemas que experimentalmente se pueden encontrar en un régimen intermedio entre esos dos límites [12] y de esta manera se está obligado a estudiar este cruce utilizando los pares de Cooper en la formación y condensación de bosones.

El problema del cruce entre las teorías de BCS y BEC (*crossover* BCS-BEC) no es nuevo; algunos de los primeros intentos de la era previa a BCS para entender teóricamente la superconductividad en metales fueron en términos de la BEC, por ejemplo los trabajos de Schafroth *et al.* [43]. Después vinieron los sorprendentes resultados de la teoría de BCS [9] y la superconductividad en metales fue finalmente entendida como un apareamiento de electrones que se comportan como un gas de bosones. Así, los pares de Cooper se traslapan severamente en el espacio real y deben pensarse como bosones compuestos [44]. De esta manera, las correlaciones en el condensado BCS son mejor descritas en términos del apareamiento en el espacio de momentos para un gas de fermiones altamente degenerado.

Existen, por supuesto, varias similitudes en el comportamiento de los superfluidos de Fermi o Bose en la medida que sus propiedades macroscópicas y de coherencia son consideradas. Sin embargo, a pesar de las similitudes entre los condensados de BCS y BE, se encuentran obvias diferencias a nivel microscópico. En particular, sus estados normales por encima de la temperatura crítica T_c son completamente diferentes.

Posiblemente la primera discusión de la posibilidad de un *crossover* entre un estado BCS y una BEC como función de algún parámetro fue introducida por D. M. Eagles [38] en el contexto de la teoría de la superconductividad para un sistema de baja concentración de portadores, como en el SrTiO₃ dopado con Zr. Tiempo después, R. Schrieffer [45] llegó a mencionar sutilmente la posibilidad de resolver dos ecuaciones, una para la densidad de partículas y la otra para el *gap* de energía.

En un trabajo trascendental A. J. Leggett [39] estudió un gas diluido de fermiones a $T = 0$ con una interacción atractiva por pares y mostró mediante un principio variacional que existe un *crossover* a partir de un estado base de BCS de pares de Cooper traslapándose en un condensado de moléculas diatómicas fuertemente ligadas. Una de sus principales motivaciones fue preguntarse hasta dónde es posible extender la descripción de los pares de Cooper en el ³He superfluido como moléculas diatómicas.

Años después, esta pregunta fue retomada por P. Nozières y S. Schmitt-Rink [41] motivados por el problema de la condensación de excitones donde podría, de hecho, ser experimentalmente posible ir de un límite al otro variando la densidad de los portadores. Estos autores extendieron el análisis previo a temperaturas finitas y mostraron que dentro de su aproximación, la T_c evoluciona suavemente como función del acoplamiento atractivo de BCS hasta el límite de Bose.

3.2. Crossover BCS-Bose

Un fluido cuántico es un sistema de muchas partículas en que se observan no sólo los efectos descritos por la mecánica cuántica, sino también los de la estadística cuántica. Así, para un sistema de muchas partículas que constituye un fluido cuántico es necesario que

no sólo se satisfaga $k_B T \lesssim n^{3/2} \hbar^2 / m$ (donde n es su densidad de partículas y m es la masa de un átomo o molécula que lo constituye), sino que también puedan cambiar de lugar sus constituyentes con bastante facilidad.

Con estas características, un fluido cuántico compuesto de átomos (o moléculas) puede encontrarse en una fase gaseosa o líquida. Para un sistema constituido por electrones el criterio es menos riguroso, en el sentido de que los electrones pueden intercambiar de lugar fácilmente (es decir, estamos tratando con un metal) entonces no importa si se mueven o no en un ambiente atómico como lo es un sólido.

Con las consideraciones anteriores podemos observar que la familia de fluidos cuánticos pueden incluir a (i) los electrones en un sólido o metal líquido y (ii) algún conjunto de átomos o moléculas que están simultáneamente en una fase líquida o gaseosa. Los miembros más conocidos de la clase (ii) incluyen a los isótopos líquidos de He (^3He , ^4He y sus mezclas) y los gases atómicos alcalinos muy diluidos. En el cuadro 3.1 se presentan algunos ejemplos de fluidos cuánticos.

Cuadro 3.1: Fluidos cuánticos (presentados en el orden cronológico de su descubrimiento).

Sistema	Estadística	Densidad (cm^{-3})	T_c (K)	Comentarios
Electrones en metales	Fermi	$\sim 10^{23}$	1–25	Estado SC descrito adecuadamente por BCS
^4He líquido	Bose	$\sim 10^{22}$	2.17	Sólo se conoce este superfluido
^3He líquido	Fermi	$\sim 10^{22}$	2×10^{-3}	Apareamiento anisotrópico
Cupratos	Fermi	$\sim 10^{21}$	1–160	Algunas veces considerado apareamiento anisotrópico
Gases alcalinos de Bose	Bose	$\sim 10^{15}$	10^{-7} – 10^{-5}	Primer sistema BEC realmente diluido
Gases alcalinos de Fermi	Fermi/Bose	$\sim 10^{12}$	10^{-6}	Crossover BCS-Bose

Un gas de fermiones sin interacción es descrito en equilibrio térmico por la distribución de Fermi-Dirac, la cual permite un máximo de una sola partícula por estado; no hay oportunidad de que una condensación como la de Bose-Einstein ocurra. Sin embargo, considere un sistema muy diluido de fermiones con una interacción atractiva suficiente para unir dos de sus constituyentes en una sola estructura acoplada y que su radio sea grande comparado con el tamaño atómico. La descripción de tal complejo de partículas puede realizarse mediante la estadística de Bose, y si el gas es suficientemente diluido pueden ignorarse las interacciones entre parejas. Se esperaría que se estableciera una BEC por debajo de una cierta T_c .

Considere que se incrementa gradualmente su densidad, manteniendo la interacción atractiva constante. Cuando las parejas de fermiones comienzan a translaparse (es decir, cuando las distancias entre ellas empiezan a ser comparables con los radios moleculares) no se pueden ignorar más las interacciones entre parejas de fermiones. Igualmente importante es el hecho de que no se pueden ignorar los efectos subyacentes a la estadística de Fermi. Sin embargo, no es absurdo imaginar que una característica que es cualitativamente similar

a la formación de las moléculas diatómicas y la BEC que ocurre en el límite diluido pueda mantenerse conforme se incrementa la densidad. Este es el llamado límite de BCS [9], en este límite las parejas son los pares de Cooper. Independientemente de si es posible construir una teoría con relaciones de conmutación para fermiones, es posible estudiar las propiedades de estos sistemas suponiendo que obedecen la estadística de Bose-Einstein.

Ya sea que uno piense el proceso de la formación de los pares de Cooper como un tipo de BEC o como algo completamente diferente, es importante apreciar que esto difiere cualitativamente de la BEC de moléculas fermiónicas diluidas en al menos dos aspectos: en primer lugar resulta que la degeneración de Fermi, la cual ocurre en el límite de alta densidad, realmente ayuda al proceso de la formación de los pares, tal que incluso una atracción entre dos partículas que sea muy débil para unir una partícula en el espacio libre puede inclusive inducir un par de Cooper. En segundo lugar, mientras en el límite del gas diluido el proceso de formación de las moléculas diatómicas puede ser pensado como algo bastante diferente de la de su BEC, en el límite BCS el proceso de formación de los pares y de su condensación son esencialmente idénticos.

A pesar de estas diferencias, es importante notar que no hay una distinción cualitativamente clara entre el proceso de la BEC en el límite del gas diluido y el proceso de formación de los pares de Cooper en el límite ultradenso, y de hecho, es posible construir una función de onda para el estado base de muchos cuerpos que se interpole de manera continua entre estos dos límites. Esto es conocido como el crossover BCS-Bose.

3.3. Ecuación de número y del gap para el crossover

A continuación se determinarán las ecuaciones que gobiernan el comportamiento entre los límites de BCS y de Bose-Einstein y se mostrará que un sistema de este tipo tiene asociadas dos ecuaciones en vez de una sola como en el caso de BCS en que sólo se obtiene la ecuación para el *gap*.

Considere la ecuación de densidad numérica a temperatura cero de la teoría de BCS

$$N = 2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2.$$

La probabilidad de ocupación $v_{\mathbf{k}}^2$ que minimiza la energía del estado base de la teoría de BCS es

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right).$$

Considerando la paridad de la onda s

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) = \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) 4\pi k^2 dk,$$

donde \mathcal{V} es el volumen del sistema. Si $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$, esto se puede reescribir como

$$N = \frac{\mathcal{V}}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\epsilon} \left(1 - \frac{\xi}{E} \right), \quad (3.1)$$

con $E = \sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}$. Sin embargo, para el gas ideal de Fermi,

$$N = 2 \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} 4\pi k^2 dk = \frac{\mathcal{V}}{3\pi^2} k_F^3 = \frac{\mathcal{V}}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E_F^{3/2}, \quad (3.2)$$

donde $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$. Eliminando N de (3.1) y (3.2) se obtiene

$$\frac{3}{4} E_F^{3/2} = \int_0^\infty d\epsilon \sqrt{\epsilon} \left(1 - \frac{\xi}{E} \right). \quad (3.3)$$

Para poder manipular esta ecuación adecuadamente se utilizará un cambio de variable para hacer adimensionales las cantidades físicas involucradas

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon/E_F, \quad \tilde{\xi} = \xi/E_F, \quad \tilde{\mu} = \mu/E_F, \quad \tilde{\Delta} = \Delta/E_F,$$

con las que se llega a la ecuación de número de partículas o simplemente ecuación de número

$$\frac{3}{4} = \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \sqrt{\tilde{\epsilon}} \left(1 - \frac{\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu}}{\sqrt{(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \right). \quad (3.4)$$

Esta es una ecuación que contiene dos incógnitas, a saber $\tilde{\mu}$ y $\tilde{\Delta}$, así que se requiere de otra ecuación para determinar apropiadamente sus valores.

Partiendo de la ecuación del *gap* de energía de BCS a temperatura cero (2.20)

$$\Delta = - \sum_{\mathbf{k}} V \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}}$$

se puede obtener la ecuación del *gap* de energía del crossover [46], y se le aplican los cambios de variable adimensionales previos para llegar a

$$\frac{\pi}{k_F a_s} = \int_0^\infty d\tilde{\epsilon} \left(\frac{1}{\sqrt{\tilde{\epsilon}}} - \frac{\sqrt{\tilde{\epsilon}}}{\sqrt{(\tilde{\epsilon} - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \right) \quad (3.5)$$

donde a_s es la longitud de dispersión de onda- s , el cual se considera como un parámetro de acoplamiento (y así se tiene la variable $1/k_F a_s$) entre los límites de BCS y BEC.

Las ecuaciones de número (3.4) y del *gap* de energía (3.5) se resuelven simultánea y numéricamente para la variable $1/k_F a_s$. En la figura 3.1 se presentan los resultados para el *gap* Δ y el potencial químico μ a temperatura cero, en unidades de E_F , como funciones de la variable $1/k_F a_s$.

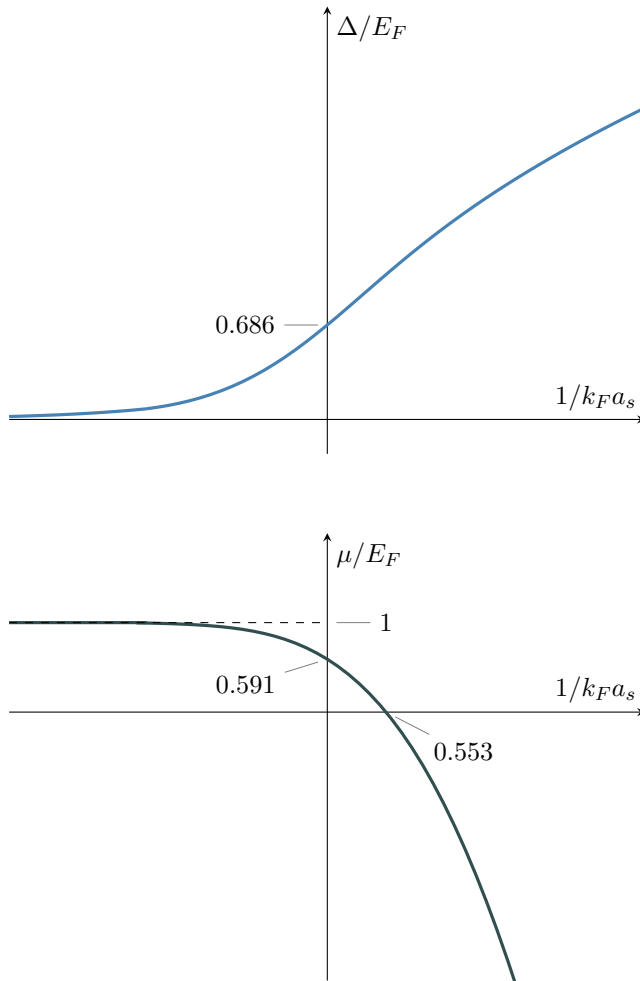


Figura 3.1: Dependencia del *gap* Δ y el potencial químico μ (en unidades de la energía de Fermi E_F) en función del parámetro $1/k_F a_s$, donde a_s es la longitud de dispersión de onda s de la interacción de dos fermiones. El código utilizado puede consultarse en el Apéndice B.

Capítulo 4

Teoría de la condensación de Bose-Einstein generalizada

En este capítulo se presenta la teoría de la condensación de Bose-Einstein generalizada (GBEC, por sus siglas en inglés). Se inicia con un hamiltoniano que incluye un término no perturbado y uno de interacción para después obtener el potencial termodinámico de gran canónico y utilizando condiciones de estabilidad se determinan las ecuaciones del GBEC. Se incluyen explícitamente los pares de Cooper de huecos.

4.1. Antecedentes

Luego del exitoso trabajo de Bardeen-Cooper-Schriffer (BCS) [9] publicado en 1957 que ofrece una teoría microscópica para superconductores (SC) que conduce a una sola ecuación para el *gap* de energía, en 1963 Schrieffer [45] afirmó que se deben resolver dos ecuaciones para determinar tanto el *gap* de energía Δ como el potencial químico μ , mientras que en BCS se fija por conveniencia a μ igual a la energía de Fermi E_F que depende sólo de la densidad del número de electrones n .

A mediados de la década de 1960 L.V. Keldysh *et al.* [47] argumentaron que la interacción coulombiana es débil si se basa en el supuesto de que la energía media de correlación es mucho menor que E_F , una condición que se satisface para una densidad de partículas pequeña, del orden de 10^{-18} a 10^{-19} cm^{-3} . En 1966, V. Popov [48] propuso una teoría para un gas de Bose formado por pares de fermiones que se comportan como tal en el límite de baja densidad formando un condensado de Bose-Einstein a temperaturas extremadamente bajas. En 1967, J. Friedel *et al.* [49] descubrieron que deben resolverse dos ecuaciones para obtener el *gap* y el potencial químico. Después de eso, D.M. Eagles [38] estudió dos ecuaciones simultáneas para el *gap* de BCS y el potencial químico asociado. Sus soluciones a temperatura $T = T_c$ se consideran actualmente como la definición del *crossover* BCS-BEC. Más tarde, A.J. Leggett [39] obtendría esas ecuaciones asociadas con el *crossover* a $T = 0$ para un sistema de muchos fermiones de masa m e interacciones interelectrónicas caracterizadas por la longitud de dispersión de onda s . Alternativamente en 1995, estas ecuaciones fueron obtenidas por R.M. Carter *et al.* [46].

Para homogeneizar los términos se designará al *crossover* BCS-Bose simplemente como *crossover*, en lugar del más conocido *crossover* BCS-BEC ya que la BEC no puede ocurrir en una ni en dos dimensiones [50] (salvo el caso especial donde se requiere una trampa magnética) pero los bosones se forman en cualquier dimensión. Los modelos bosón-fermión (BF) de SCs como una BEC son anteriores a la teoría de BCS-Bogoliubov [33, 51]. Desde

mediados de la década de 1950 aparecieron otros trabajos [43, 52] tratando a los SCs de esta manera, es decir, considerando a los pares de Cooper de electrones (2eCP) como bosones reales (*cf.* Ref. [53]). La mayoría de los modelos BF no consideran la existencia ni la presencia de los huecos¹, mucho menos los pares de huecos, los cuales en este trabajo se incluyen en igualdad de condiciones con los 2eCPs con lo que se construye de esta manera un modelo completo BF que es esencialmente lo que describe la teoría de la condensación de Bose-Einstein generalizada (GBEC por sus siglas en inglés).

Dos de las premisas fundamentales aceptadas por la mayor parte de la comunidad científica relacionada con la materia condensada son que:

- a. La superconductividad y la superfluidez son esencialmente el mismo fenómeno, los cuáles ocurren en un sistema cargado y uno eléctricamente neutro, respectivamente.
- b. Estos fenómenos son el resultado, en un sistema de fermiones, de la formación de pares de Cooper y en un sistema de bosones de una BEC, respectivamente.

Como ya se abordó en el Capítulo 3, en los años 1960 Friedel *et al.* [49] observaron que la teoría de BCS necesitaba una ecuación adicional donde el potencial químico μ fuera diferente de la energía de Fermi como debe ocurrir cuando el acoplamiento no es débil. Introducen una nueva expresión para completar la descripción del sistema, esencialmente una ecuación para μ . Además Eagles [38] aclara esta formulación introduciendo una ecuación de densidad de partículas complementaria a la ecuación de BCS. Esto relaciona la temperatura crítica T_c con la concentración de portadores n y se convierte en la teoría del *crossover* BCS-Bose.

Un *crossover* BCS-Bose extendido surge si se postula la presencia explícita de pares de Cooper de huecos (2hCP), en adición a los pares de Cooper de electrones (2eCP). Entonces se tienen densidades de número de 2hCPs condensados y excitados, en conjunto con los 2eCPs también condensados y excitados.

4.2. Modelo completo bosón-fermión

Una de las propuestas que se consideran para unificar la teoría de BCS y la BEC en términos de un modelo bosón-fermión es la teoría de la condensación de Bose-Einstein generalizada (GBEC, por sus siglas en inglés). Existe una clara distinción que debe considerarse esencial entre los pares de Cooper (CP) que siguen una estadística de Bose y los pares de electrones de BCS que no pueden ser considerados bosones.

Se considera la relación de dispersión de los CPs cuadrática en el término del momento del centro de masa (CMM por sus siglas en inglés), debido a que los CPs se propagan en un mar de Fermi. El formalismo GBEC describe un gas ternario, cuyos constituyentes

¹Un hueco de electrón, o simplemente hueco, es la ausencia de un electrón en la banda de valencia. Una banda de valencia completa es característica de los aislantes y de los semiconductores. La noción de hueco, desarrollada por W. Heisenberg en 1931, es esencialmente un modo sencillo y útil para analizar el movimiento de un gran número de electrones, considerando expresamente tal ausencia o hueco de electrones como si fuera una cuasipartícula [20].

son electrones libres desapareados junto con pares de Cooper, tanto de electrones como de huecos (condensados y excitados) [44, 54–56].

Para obtener las ecuaciones del GBEC se considera un sistema cuyo hamiltoniano describe a los elementos del gas ternario suponiendo que los 2eCPs y los 2hCPs ya se han formado. El hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_0$ describe un sistema no perturbado que corresponde a un estado normal; se trata de una mezcla de un gas ideal de fermiones desapareados, es decir, sin interacción, junto con ambos tipos de CPs.

El hamiltoniano no perturbado $\hat{\mathcal{H}}_0$ se escribe como

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{K}} E_+(\mathbf{K}) \hat{b}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{K}} - \sum_{\mathbf{K}} E_-(\mathbf{K}) \hat{c}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{K}}, \quad (4.1)$$

donde $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ es el vector de onda de los CPs en el CMM, mientras que $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_e$ es la energía de un sólo electrón y $E_{\pm}(\mathbf{K})$ son las energías fenomenológicas de los 2eCPs (+) y 2hCPs (-).

Además $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ ($\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$) es el operador de creación (aniquilación) para electrones y similarmente $\hat{b}_{\mathbf{K}}$ y $\hat{c}_{\mathbf{K}}$ lo son para 2eCPs y 2hCPs respectivamente, los cuales dependen sólo de \mathbf{K} , son objetos que obedecen la estadística de Bose-Einstein y por lo tanto son distintos de los pares de BCS que dependen tanto de \mathbf{k} como de \mathbf{K} y no son estrictamente bosones.

Un par de huecos es considerado distinto e independiente cinemáticamente de un par de electrones ya que sus relaciones de conmutación involucran un cambio relativo de signo, en contraste con los electrones o huecos individuales, cuyas relaciones de anticonmutación no lo hacen. En el Apéndice A.1 se presenta una discusión a fondo sobre la conmutación y anticonmutación de estos operadores.

El hamiltoniano de interacción $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ consta de cuatro vértices de interacción bosón-fermión distintos, cada uno con dos fermiones y un bosón, que representan la forma en que los electrones no apareados (+) o huecos (-) se combinan para formar o disociar a los 2eCPs y 2hCPs en un sistema tridimensional de tamaño L :

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} = & L^{-3/2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{K}} f_+(\mathbf{k}) \left(\hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \downarrow}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{K}} + \hat{a}_{-\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \uparrow} \hat{b}_{\mathbf{K}}^\dagger \right) \\ & + L^{-3/2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{K}} f_-(\mathbf{k}) \left(\hat{o}_{\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \uparrow} \hat{o}_{-\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{K}}^\dagger + \hat{o}_{-\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \downarrow}^\dagger \hat{o}_{\mathbf{k}+\frac{1}{2}\mathbf{K}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{K}} \right), \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde $f_{\pm}(\mathbf{k})$ son las transformadas de Fourier de las funciones de onda $\varphi_{\pm}(\mathbf{r})$ de electrones (+) y huecos (-) respectivamente, mientras que $\hat{o}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ ($\hat{o}_{\mathbf{k}\sigma}$) es el operador de creación (aniquilación) para huecos. En la primer suma se representan mediante la función fenomenológica $f_+(\mathbf{k})$ los siguientes procesos:

- (a) Aniquilación de un 2eCP con vector de onda \mathbf{K} mediante la creación simultánea de dos electrones desapareados con vectores de onda $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}$ y $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{K}$, tales que $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{K}$ y $\mathbf{k} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ es el vector de onda relativo. Note que estos fermiones presentan proyecciones de espín opuestas (\uparrow y \downarrow).

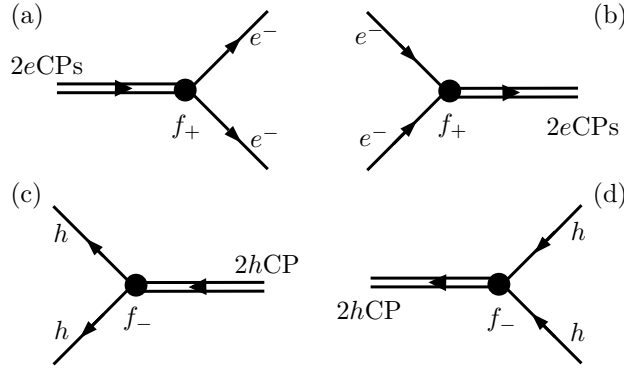


Figura 4.1: Diagramas de Feynman que representan las interacciones del hamiltoniano (4.2). (a) Aniquilación de un 2eCP y creación de dos fermiones, (b) creación de un 2eCP y aniquilación de dos fermiones. (c) Creación de un 2hCP y aniquilación de dos huecos y (d) aniquilación de un 2hCP y creación de dos huecos.

- (b) Creación de un 2eCP con vector de onda \mathbf{K} mediante la aniquilación simultánea de dos electrones desapareados con vectores de onda \mathbf{k}_2 y \mathbf{k}_1 y proyecciones de espín opuestas.

En la segunda suma de (4.2) se representan mediante la función fenomenológica $f_-(\mathbf{k})$ los procesos:

- (c) Creación de un 2hCP con vector de onda \mathbf{K} mediante la aniquilación simultánea de dos huecos con vectores de onda \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 y proyecciones de espín opuestos.
- (d) Aniquilación de un 2hCP con vector de onda \mathbf{K} mediante la creación simultánea de dos huecos con vectores de onda \mathbf{k}_2 y \mathbf{k}_1 y proyecciones de espín opuestos.

En la Figura 4.1 se representan los cuatro procesos elementales que forman el hamiltoniano de interacción. El momento angular total y las proyecciones de espín de las partículas que participan en cada proceso se conservan, así como el número de fermiones.

El hamiltoniano del sistema será

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$$

el cual se utiliza en los resultados de la mecánica estadística cuántica para determinar las propiedades termodinámicas del gas ternario.

4.3. Potencial termodinámico

El sistema se supone en un contenedor de volumen $\mathcal{V} = L^3$. Este contenedor se coloca a su vez en un reservorio que se caracteriza por una temperatura absoluta T constante y por algún valor del potencial químico μ , es decir, se asume que las paredes del contenedor

son permeables para el calor pero se mantiene todo el tiempo constante la temperatura T sobre él. Además las paredes son permeables para los fermiones de tal manera que se mantiene constante el potencial químico. Así, se permite que el sistema de muchos fermiones intercambie libremente las partículas y el calor con sus alrededores.

Colocando el sistema de muchos fermiones dentro del reservorio, este deberá permanecer en algún estado de equilibrio termodinámico, es decir, en algún estado caracterizado por los parámetros \mathcal{V} , T y μ . De acuerdo con la mecánica estadística, el potencial termodinámico o gran potencial Ω se relaciona con la energía interna U , la entropía S y el número de partículas N como

$$\Omega = F - \mu N = U - TS - \mu N.$$

donde F es la energía libre de Helmholtz

El potencial termodinámico se define como

$$\Omega(T, \mathcal{V}, N, \mu) = -k_B T \ln \left\{ \text{Tr} \exp \left[-\beta (\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N}) \right] \right\} \quad (4.3)$$

donde T es la temperatura absoluta, $\beta = 1/k_B T$, k_B es la constante de Boltzmann, μ es el potencial químico del sistema y Tr es la traza del operador. Asimismo $\hat{\mathcal{H}}$ es el hamiltoniano del sistema (4.1)+(4.2) y \hat{N} es el operador del número total de partículas N dentro del sistema

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} + 2 \sum_{\mathbf{K}} \hat{b}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{K}} - 2 \sum_{\mathbf{K}} \hat{c}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{K}}. \quad (4.4)$$

Este operador afirma que el número total de partículas en el sistema consta del número de electrones desligados, más los electrones apareados en 2eCPs, menos el número de huecos desapareados 2hCPs, recordando que estos últimos tienen carga opuesta a los electrones. Así, como los huecos poseen carga $+e$, si se multiplica a (4.4) por la carga $-e$ de los fermiones, el resultado expresa la conservación de la carga del sistema. Note que el hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ conmuta con \hat{N} .

Sin embargo, no es físicamente correcto considerar las cantidades macroscópicas de un superconductor en equilibrio termodinámico (como el calor específico, o el campo magnético crítico) cuando el SC no posee carga eléctrica y se caracteriza su entorno sólo por el potencial químico, es decir, no se tiene un intercambio de electrones entre el superconductor y su entorno. Por lo tanto será mejor fijar, bajo condiciones de equilibrio termodinámico, el valor del número de partículas N . Así, el volumen, la temperatura y el número total de partículas queda fijo. En el límite termodinámico la densidad de electrones es constante, $n = N/L^3$. Las cantidades termodinámicas son la entropía $S(T, n)$ y la capacidad calorífica $C_V(T, n)$ ambas como funciones de la densidad de partículas y la temperatura.

Para asegurar la diagonalización del hamiltoniano utilizamos la propuesta de Bogoliubov [33] y se considera que los 2eCPs y 2hCPs se encuentran condensados en el estado con $\mathbf{K} = 0$. Ignorando del hamiltoniano total $\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N}$ los términos con momento del centro de

masa $\mathbf{K} \neq 0$ para los bosones, se construye el hamiltoniano reducido

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{\text{red}} = & \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} + [E_+(0) - 2\mu] \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0 + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [E_+(\mathbf{K}) - 2\mu] \hat{b}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{K}} \\
& + [2\mu - E_-(0)] \hat{c}_0^\dagger \hat{c}_0 + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [2\mu - E_-(\mathbf{K})] \hat{c}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{K}} \\
& + L^{-3/2} \sum_{\mathbf{k}} f_+(\mathbf{k}) \left(\hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger \hat{b}_0 + \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow} \hat{b}_0^\dagger \right) \\
& + L^{-3/2} \sum_{\mathbf{k}} f_-(\mathbf{k}) \left(\hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger \hat{c}_0^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow} \hat{c}_0 \right),
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Note que del hamiltoniano no perturbado se han separado los dos términos con $\mathbf{K} = 0$. Siguiendo la técnica de Bogoliubov, para que se presente una BEC de 2eCPs y 2hCPs con $\mathbf{K} = 0$ se reemplazarán los operadores de creación y aniquilación de bosones por una cantidad que denota el número de partículas condensadas, es decir, $\hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0$ por N_0 que denota el número de 2eCPs condensados y análogamente $\hat{c}_0^\dagger \hat{c}_0$ por M_0 que denota el número de 2hCPs condensados. Adicionalmente se han sustituido los operadores de 2hCPs por los de 2eCPs ($\hat{o} \rightarrow \hat{a}^\dagger$ y $\hat{o}^\dagger \rightarrow \hat{a}$) para simplificar el cálculo, esto no modifica el significado de la expresión. De esta manera el hamiltoniano reducido queda

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{\text{red}} = & [E_+(0) - 2\mu] N_0 + [2\mu - E_-(0)] M_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} \\
& + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [E_+(\mathbf{K}) - 2\mu] \hat{b}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [2\mu - E_-(\mathbf{K})] \hat{c}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{K}} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} [\sqrt{n_0} f_+(\mathbf{k}) + \sqrt{m_0} f_-(\mathbf{k})] \left(\hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow} \right)
\end{aligned} \tag{4.6}$$

donde $\hat{b}_0^\dagger, \hat{b}_0$ se han sustituido por $\sqrt{N_0}$ y $\hat{c}_0^\dagger, \hat{c}_0$ se han sustituido por $\sqrt{M_0}$. Adicionalmente se define la densidad de 2eCPs condensados como $n_0 = N_0/L^3$ y la densidad de 2hCPs condensados como $m_0 = M_0/L^3$.

Note que el hamiltoniano reducido ahora depende explícitamente de las densidades de pares de Cooper de electrones y huecos condensados, n_0 y m_0 , las cuales se han introducido como parámetros independientes. Con el hamiltoniano reducido se calcula el potencial termodinámico utilizando (4.3), el cual ahora tiene la dependencia $\Omega = \Omega(T, \mu, n_0, m_0)$.

En el Apéndice A.2 se presenta un detallado desarrollo matemático para diagonalizar el hamiltoniano reducido (4.6) y poder determinar el potencial termodinámico (4.3). El resultado es el hamiltoniano reducido diagonal

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{\text{red}} = & \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) + E_0 \\
& + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [E_+(\mathbf{K}) - 2\mu] \hat{b}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [2\mu - E_-(\mathbf{K})] \hat{c}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{K}}
\end{aligned} \tag{4.7}$$

donde se han definido $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$, $E_0 = [E_+(0) - 2\mu]N_0 + [2\mu - E_-(0)]M_0$, la energía

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2},$$

y el *gap* de energía del GBEC

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sqrt{n_0}f_+(\mathbf{k}) + \sqrt{m_0}f_-(\mathbf{k}). \quad (4.8)$$

Se introducen los operadores de creación y aniquilación $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ que permiten que bajo una transformación de Bogoliubov-Valatin el hamiltoniano reducido sea diagonal [33].

Para calcular la traza del hamiltoniano reducido se utilizan los eigenestados y los eigenvalores del sistema definidos por la ecuación de valores propios (vea el Apéndice A.3)

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{red}} |n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}\rangle = E_{\{n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}\}} |n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}\rangle \quad (4.9)$$

El potencial termodinámico será

$$\begin{aligned} \Omega(T, \mu, n_0, m_0) &= -k_B T \ln \left[\text{Tr} \exp \left(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{red}} \right) \right] \\ &= -k_B T \ln \left[\sum_{n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}} \langle n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}} | \exp \left(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{red}} \right) | n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}} \rangle \right] \\ &= E_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - 2k_B T \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + \exp(-\beta E_{\mathbf{k}})] \\ &\quad + \sum_{\mathbf{K} \neq \mathbf{0}} \ln \{1 - \exp[-\beta(E_+(\mathbf{K}) - 2\mu)]\} \\ &\quad + \sum_{\mathbf{K} \neq \mathbf{0}} \ln \{1 - \exp[-\beta(2\mu - E_-(\mathbf{K}))]\} \end{aligned}$$

Al convertir la suma sobre \mathbf{k} en una integral de la energía ϵ se obtiene

$$\begin{aligned} \Omega(T, \mu, n_0, m_0) &= \\ &\int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) [\epsilon - \mu - E(\epsilon)] \\ &\quad - 2k_B T \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \ln \{1 + \exp[-\beta E(\epsilon)]\} \\ &\quad + [E_+(0) - 2\mu]n_0 + k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \ln \{1 - \exp[-\beta \mathcal{E}_+(\eta)]\} \\ &\quad + [2\mu - E_-(0)]m_0 + k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \ln \{1 - \exp[-\beta \mathcal{E}_-(\eta)]\} \end{aligned} \quad (4.10)$$

donde

$$N(\epsilon) = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \sqrt{\epsilon} \quad M(\eta) = \frac{2m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\eta} \quad (4.11)$$

son la densidad de estados (DOS) de fermiones (electrones) y bosones respectivamente, mientras que

$$E(\epsilon) = \sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta(\epsilon)^2}$$

es la relación de dispersión de Bogoliubov para fermiones donde el *gap* de energía

$$\Delta(\epsilon) = f_+(\epsilon)\sqrt{n_0} + f_-(\epsilon)\sqrt{m_0}$$

está evidentemente relacionado con las densidades de número de $2e/2h$ CPs condensados n_0 y m_0 . Además, por conveniencia en el cálculo se han definido las energías

$$\mathcal{E}_+ = \eta + E_+(0) - 2\mu, \quad \mathcal{E}_- = 2\mu - E_-(0) + \eta.$$

4.4. Ecuaciones del GBEC

Las condiciones de equilibrio requieren que la energía libre de Helmholtz F sea mínima para una densidad fija de electrones n , con respecto de μ , n_0 y m_0 por lo que se requiere que

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -n, \quad \frac{\partial F}{\partial n_0} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial m_0} = 0, \quad (4.12)$$

donde n incluye tanto a los fermiones no apareados como a los pares de fermiones condensados y excitados. Al realizar las operaciones marcadas por (4.12), se obtienen tres ecuaciones trascendentales acopladas en función de la temperatura absoluta T .

En el equilibrio [55] la teoría GBEC ofrece tres ecuaciones trascendentales acopladas cuya solución (simultánea y numéricamente) aporta tres fases: dos fases de partículas condensadas BEC para los $2e$ CPs y $2h$ CPs así como una fase mixta con proporciones arbitrarias de ambos CPs [11].

Las ecuaciones que obtienen utilizando las condiciones de equilibrio (4.12) y determinan la teoría GBEC son:

I. Dos ecuaciones tipo gap

$$2\sqrt{n_0}[E_+(0) - 2\mu] = \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \frac{\Delta(\epsilon)f_+(\epsilon)}{E(\epsilon)} \tanh\left[\frac{1}{2}\beta E(\epsilon)\right], \quad (4.13)$$

$$2\sqrt{m_0}[2\mu - E_-(0)] = \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \frac{\Delta(\epsilon)f_-(\epsilon)}{E(\epsilon)} \tanh\left[\frac{1}{2}\beta E(\epsilon)\right], \quad (4.14)$$

donde se definirá a $f_\pm(\epsilon)$ como:

$$f_+(\epsilon) = \begin{cases} f, & E_f < \epsilon < E_f + \delta\epsilon \\ 0, & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (4.15)$$

$$f_-(\epsilon) = \begin{cases} f, & E_f - \delta\epsilon < \epsilon < E_f \\ 0, & \text{en otro caso,} \end{cases}$$

con

$$E_f \equiv \frac{1}{4}[E_+(0) + E_-(0)], \quad \delta\epsilon \equiv \frac{1}{2}[E_+(0) - E_-(0)]$$

siendo $\delta\epsilon$ que define el cascarón de energía alrededor de E_f , mientras que $E_{\pm}(0)$ es la energía de los pares de Cooper (2eCPs con + y 2hCPs con -) en $\mathbf{K} = 0$. Estas dos nuevas energías reemplazaran a los energías fenomenológicas $E_+(0)$ y $E_-(0)$ como los parámetros que relacionan a los pares de electrones y los pares de huecos. Combinando las dos relaciones anteriores se tiene

$$E_{\pm}(0) = 2E_f \pm \delta\epsilon. \quad (4.16)$$

II. Una ecuación de número de partículas que garantiza la conservación de la carga, es decir, invariancia de norma [57] (la teoría de BCS carece de esta cualidad)

$$n = 2n_0(T) + 2n_{B+}(T) - 2m_0(T) - 2m_{B+}(T) + n_f(T) \quad (4.17)$$

donde

$$n_{B+}(T) = \int_0^{\infty} d\eta M(\eta) [\exp(\beta(E_+(0) + \eta - 2\mu) - 1)]^{-1} \quad (4.18)$$

$$m_{B+}(T) = \int_0^{\infty} d\eta M(\eta) [\exp(\beta(2\mu - E_-(0) + \eta) - 1)]^{-1} \quad (4.19)$$

son las densidades de pares 2eCPs y 2hCPs, ambos excitados, mientras que la cantidad

$$n_f(T) \equiv \int_0^{\infty} d\epsilon N(\epsilon) \left[1 - \frac{\epsilon - \mu}{E(\epsilon)} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E(\epsilon)\right) \right] \quad (4.20)$$

es la densidad de electrones no apareados.

De (4.13), (4.14) y (4.17) se puede calcular el *gap* de energía Δ y el potencial químico μ ambos como funciones de T . Para esto, definimos dos nuevos parámetros: una densidad numérica

$$n/n_f(T=0) \equiv n/n_f \quad (4.21)$$

que sirve como parámetro de acoplamiento adimensional, donde $n_f = (2mE_f)^{3/2}/3\pi^2\hbar^3$. Además, se utiliza el parámetro de acoplamiento (adimensional) original de GBEC definido como

$$G \equiv \frac{f^2 m^{3/2}}{2^{5/2} \pi^2 \hbar^3 E_f^{1/2}} \quad (4.22)$$

donde f es la magnitud del vértice de interacción. Estas definiciones fueron inicialmente introducidas por V.V. Tolmachev [55] y posteriormente desarrolladas por I. Chávez *et al.* [10]. E_f no debe confundirse con la energía de Fermi E_F cuando *todos* los electrones están desacoplados.

4.5. Casos límite del crossover BCS-Bose extendido

El primer caso se presenta al suponer que las proporciones de pares de electrones y pares de huecos son las mismas, es decir, se postula una proporción 50-50 por lo que $n_0(T) = m_0(T)$ y de (4.8)

$$n_0(T) = m_0(T) = \Delta^2(T)/4f^2.$$

Las ecuaciones para el *crossover* con esta condición implican que, para (4.13)

$$2[E_+(0) - 2\mu] = \int_{E_f}^{E_f+\delta\epsilon} d\epsilon N(\epsilon) \frac{f^2}{E(\epsilon)} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E(\epsilon)\right),$$

Análogamente para (4.14)

$$2[2\mu - E_-(0)] = \int_{E_f-\delta\epsilon}^{E_f} d\epsilon N(\epsilon) \frac{f^2}{E(\epsilon)} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E(\epsilon)\right).$$

Sumando estos dos resultados y suponiendo $f_+ = f_- = f$ para simplificar el cálculo debido a que no se conoce de manera analítica ni fenomenológica la forma real de esta función de interacción, por lo que se supone simplemente como una constante, se obtiene

$$\begin{aligned} [E_+(0) - E_-(0)] &= \int_{E_f-\delta\epsilon}^{E_f+\delta\epsilon} d\epsilon N(\epsilon) \frac{f^2}{E(\epsilon)} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E(\epsilon)\right) \\ 2\delta\epsilon &= \int_{E_f-\delta\epsilon}^{E_f+\delta\epsilon} d\epsilon N(\epsilon) \frac{f^2}{E(\epsilon)} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E(\epsilon)\right). \end{aligned}$$

Haciendo $E_f \simeq \mu$ se obtiene:

$$1 = \frac{f^2}{2\delta\epsilon} N(0) \int_0^{\delta\epsilon} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}\right). \quad (4.23)$$

donde se usó el cambio de variable $\xi = \epsilon - \mu$ y si se realiza la identificación $\delta\epsilon = \hbar\omega$ y $f^2/2\delta\epsilon = V$ se obtiene precisamente la ecuación del *gap* de energía de BCS (2.27)

$$1 = N(0)V \int_0^{\hbar\omega} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}\right).$$

Al recobrar la ecuación de la brecha de energía de BCS, esto significa que se obtiene el límite de acoplamiento débil.

La temperatura crítica T_c es la temperatura a la que los pares comienzan a condensarse; se puede decir que en ese momento hay cero pares condensados $n_0(T_c) = 0$ y muy pocos pares acoplados, $n_f(T_c) \rightarrow 0$, entonces de (4.17)

$$\begin{aligned} n &= 2n_0(T_c) + 2n_{B^+}(T_c) + n_f(T_c) \\ &= 0 + 2 \int_0^\infty d\eta M(\eta) [\exp(\beta_c \eta) - 1]^{-1} + n_f(T_c). \end{aligned}$$

Usando la densidad de estados $M(\eta)$ de (4.11) y la integral $\int_0^\infty dx \sqrt{x}/(e^x - 1) = \Gamma(3/2)\zeta(3/2)$ se obtiene

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{n - n_f(T_c)}{\zeta(3/2)} \right)^{2/3}.$$

En el límite de acoplamiento fuerte, cuando el número de pares de electrones no acoplados es muy pequeño, es decir $n_f(T_c) \rightarrow 0$, se recupera el valor de la temperatura de condensación de Bose-Einstein (2.30).

4.6. Gap de energía

Utilizando la densidad de estados (4.11) y la energía (4.16) en (4.13) y (4.14), junto con E_f para normalizar las cantidades $x = \epsilon/E_f$, $\tilde{\Delta} = \Delta/E_f$ y $\tilde{\mu} = \mu/E_f$, además de definir a $\delta e = \delta\epsilon/E_f$, se obtiene

$$\begin{aligned} 2\sqrt{n_0} [2E_f + \delta\epsilon - 2\mu] &= f^2 \sqrt{n_0} \frac{(mE_f)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_1^{1+\delta e/E_f} dx \frac{\sqrt{x}}{E_f \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E\right) \\ 1 + \frac{\delta\epsilon}{2E_f} - \tilde{\mu} &= \underbrace{\frac{f^2 m^{3/2}}{2^{5/2}\pi^2\hbar^3 E_f^{1/2}}}_{G} \int_1^{1+\delta e/E_f} dx \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E\right) \\ 1 + \frac{\delta e}{2} - \tilde{\mu} &= G \int_1^{1+\delta e} dx \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh\left[\frac{1}{2} \frac{1}{T/T_f} \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}\right], \end{aligned} \tag{4.24}$$

$$\begin{aligned} 2\sqrt{m_0} [2\mu - 2E_f + \delta\epsilon] &= f^2 \sqrt{m_0} \frac{(mE_f)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_{1-\delta e/E_f}^1 dx \frac{\sqrt{x}}{E_f \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E\right) \\ \tilde{\mu} - 1 + \frac{\delta\epsilon}{2E_f} &= \underbrace{\frac{f^2 m^{3/2}}{2^{5/2}\pi^2\hbar^3 E_f^{1/2}}}_{G} \int_{1-\delta e/E_f}^1 dx \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E\right) \\ \tilde{\mu} - 1 + \frac{\delta e}{2} &= G \int_{1-\delta e}^1 dx \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh\left[\frac{1}{2} \frac{1}{T/T_f} \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}\right]. \end{aligned} \tag{4.25}$$

Se ha definido a T_f mediante $E_f = k_B T_f$. Aplicando los mismos cambios de variable a (4.17), tenemos:

$$\begin{aligned}
n &= 2n_0 - 2m_0 + 2 \int_0^\infty d\eta M(\eta) [\exp(\beta\mathcal{E}_+) - 1]^{-1} - 2 \int_0^\infty d\eta M(\eta) [\exp(\beta\mathcal{E}_-) - 1]^{-1} \\
&\quad + \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \left[1 - \frac{\epsilon - \mu}{E(\epsilon)} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E\right) \right], \\
&= \underbrace{\frac{(2mE_f)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}}_{n_f} \left(\frac{3\pi^2\hbar^3}{\sqrt{2}(mE_f)^{3/2}} (n_0 - m_0) \right. \\
&\quad \left. + 3\sqrt{2} \int_{0+}^\infty dy\sqrt{y} [\exp(\beta\mathcal{E}_+) - 1]^{-1} - 3\sqrt{2} \int_{0+}^\infty dy\sqrt{y} [\exp(\beta\mathcal{E}_-) - 1]^{-1} \right. \\
&\quad \left. + \frac{3}{4} \int_0^\infty dx\sqrt{x} \left[1 - \frac{x - \tilde{\mu}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E\right) \right] \right), \\
\frac{n}{n_f} &= \frac{3\pi^2\hbar^3}{\sqrt{2}(mE_f)^{3/2}} (n_0 - m_0) \\
&\quad + 3\sqrt{2} \int_{0+}^\infty dy\sqrt{y} [\exp(\beta\mathcal{E}_+) - 1]^{-1} - 3\sqrt{2} \int_{0+}^\infty dy\sqrt{y} [\exp(\beta\mathcal{E}_-) - 1]^{-1} \\
&\quad + \frac{3}{4} \int_0^\infty dx\sqrt{x} \left[1 - \frac{x - \tilde{\mu}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E\right) \right].
\end{aligned}$$

Tenga en cuenta que la última integral debe separarse debido al rango de validez de Δ en $x \in [1 - \delta e, 1 + \delta e]$. Así

$$\begin{aligned}
\frac{n}{n_f} &= \frac{3\pi^2\hbar^3}{\sqrt{2}(mE_f)^{3/2}} (n_0 - m_0) \\
&\quad + 3\sqrt{2} \int_0^\infty dy\sqrt{y} \left[\exp\left(\frac{y + 2 + \delta e - 2\tilde{\mu}}{T/T_f}\right) - 1 \right]^{-1} \\
&\quad - 3\sqrt{2} \int_0^\infty dy\sqrt{y} \left[\exp\left(\frac{y - 2 + \delta e + 2\tilde{\mu}}{T/T_f}\right) - 1 \right]^{-1} \\
&\quad + \frac{3}{4} \int_0^{1-\delta e} dx\sqrt{x} \left[1 - \frac{x - \tilde{\mu}}{|x - \tilde{\mu}|} \tanh\left(\frac{1}{2}\frac{1}{T/T_f}|x - \tilde{\mu}|\right) \right] \\
&\quad + \frac{3}{4} \int_{1-\delta e}^{1+\delta e} dx\sqrt{x} \left[1 - \frac{x - \tilde{\mu}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh\left(\frac{1}{2}\frac{1}{T/T_f}\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}\right) \right] \\
&\quad + \frac{3}{4} \int_{1+\delta e}^\infty dx\sqrt{x} \left[1 - \frac{x - \tilde{\mu}}{|x - \tilde{\mu}|} \tanh\left(\frac{1}{2}\frac{1}{T/T_f}|x - \tilde{\mu}|\right) \right].
\end{aligned} \tag{4.26}$$

Para hacer un acercamiento con la teoría de BCS es necesario suponer que las densidades de 2hCPs son cero, pues en esta teoría no se incluyen estos pares. Sin embargo, se ha sugerido previamente [15] que los pares de huecos son indispensables para que la teoría del GBEC reproduzca el resultado que ofrece BCS. Si las densidades de 2eCPs y 2hCPs son iguales, esto es $n_0 = m_0$, llamaremos a este caso 50-50. Se ha calculado previamente por M. Grether *et al.* [44] el valor de n/n_f que lleva al límite de BCS, es decir $n/n_f = 1$ y también se obtiene el valor de la razón $\tau = T_c/T_f = 7.64 \times 10^{-6}$. Si se suma (4.24) y (4.25) y se aplican estas condiciones se obtiene

$$\delta e = G \int_{1-\delta e}^{1+\delta e} dx \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh \left[\frac{1}{2} \frac{1}{\tau T/T_c} \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2} \right], \quad (4.27)$$

mientras que para la ecuación numérica (4.26)

$$\begin{aligned} 1 = & 3\sqrt{2} \int_0^\infty dy \sqrt{y} \left[\exp \left(\frac{y + 2 + \delta e - 2\tilde{\mu}}{\tau T/T_c} \right) - 1 \right]^{-1} \\ & - 3\sqrt{2} \int_0^\infty dy \sqrt{y} \left[\exp \left(\frac{y - 2 + \delta e + 2\tilde{\mu}}{\tau T/T_c} \right) - 1 \right]^{-1} \\ & + \frac{3}{4} \int_0^{1-\delta e} dx \sqrt{x} \left[1 - \frac{x - \tilde{\mu}}{|x - \tilde{\mu}|} \tanh \left(\frac{1}{2} \frac{1}{\tau T/T_c} |x - \tilde{\mu}| \right) \right] \\ & + \frac{3}{4} \int_{1-\delta e}^{1+\delta e} dx \sqrt{x} \left[1 - \frac{x - \tilde{\mu}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh \left(\frac{1}{2} \frac{1}{\tau T/T_c} \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2} \right) \right] \\ & + \frac{3}{4} \int_{1+\delta e}^\infty dx \sqrt{x} \left[1 - \frac{x - \tilde{\mu}}{|x - \tilde{\mu}|} \tanh \left(\frac{1}{2} \frac{1}{\tau T/T_c} |x - \tilde{\mu}| \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Se tiene un sistema de dos ecuaciones integrales, trasendentales y acopladas para $\tilde{\Delta}$ y $\tilde{\mu}$. El sistema (4.27) y (4.28) se resuelve numéricamente en función de T/T_c (ver Fig. 4.2).

En la Ref. [11] la brecha energética se calculó a partir de la teoría GBEC que, como antes, incluye a la teoría BCS como un caso especial. Se puede definir una relación entre las densidades de electrones y de huecos con el objetivo de contener en una sola ecuación las distintas proporciones entre bosones, ya sean electrones o huecos. Sea $m_0 \equiv \alpha^2 n_0$, donde $0 \leq \alpha \leq 1$ varía continuamente. Si $\alpha = 1$ se recupera la teoría BCS pues en este caso $m_0 = n_0$. Si sólo se consideran los 2eCPs, se tiene $\alpha = 0$ y por lo tanto $m_0 = 0$. Si se agrega esta relación a la ecuación de densidad numérica (4.26) se tiene

$$\begin{aligned} \frac{n}{n_f} = & \frac{3(1 - \alpha) \tilde{\Delta}^2}{8(1 + \alpha) G} \\ & + 3\sqrt{2} \int_0^\infty dy \sqrt{y} [\exp(\beta \mathcal{E}_+) - 1]^{-1} - 3\sqrt{2} \int_0^\infty dy \sqrt{y} [\exp(\beta \mathcal{E}_-) - 1]^{-1} \\ & + \frac{3}{4} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \left[1 - \frac{x - \tilde{\mu}}{\sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2}} \tanh \left(\frac{1}{2\tau T/T_c} \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.29)$$

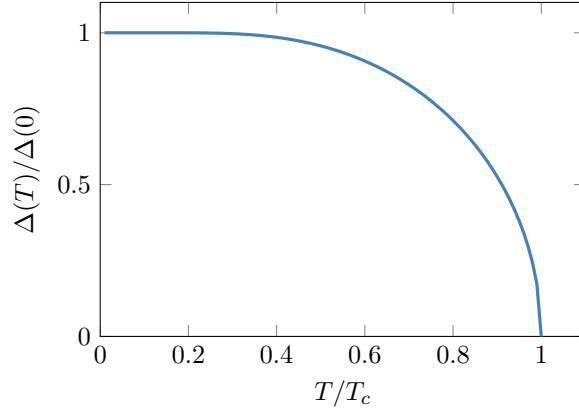


Figura 4.2: Brecha energética $\Delta/\Delta(0)$ vs T/T_c para el GBEC.

Otro caso importante es si sólo se tienen 2eCPs, llamado el caso 100-0. Se puede utilizar un valor ligeramente diferente de n/n_f , entonces se obtiene un sistema de ecuaciones integrales trascendentales (adimensional) y acoplado para $\tilde{\Delta}$ y $\tilde{\mu}$. En la Fig. 4.3 se presentan los casos 50-50 y 100-0, se comparan con los datos del *gap* energético para dos elementos superconductores, Sn y Pb.

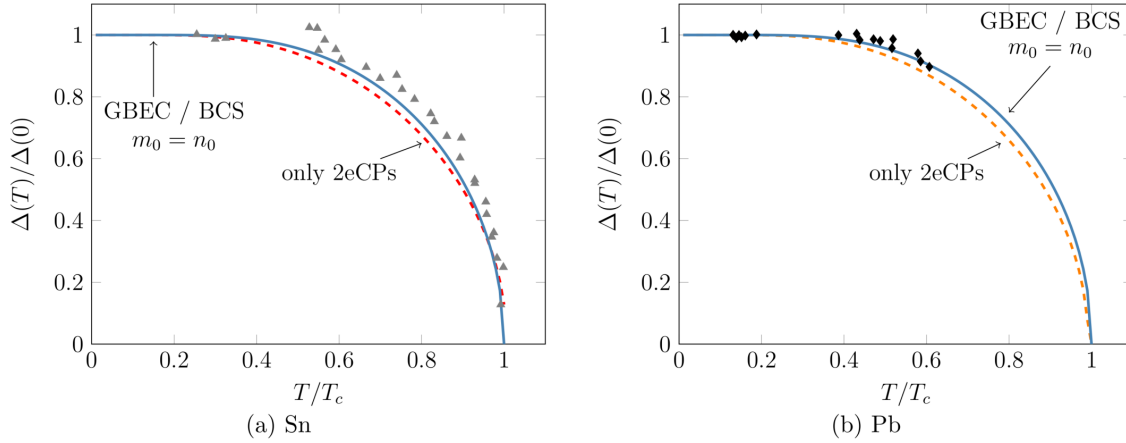


Figura 4.3: Gráfica del *gap* de energía $\Delta(T)/\Delta(0)$ vs. T/T_c de la teoría GBEC al resolver simultáneamente (4.24), (4.25) y (4.26). a) Para el Sn, el caso $n_0 = m_0$ (50-50) muestra una curva que coincide exactamente con la curva del *gap* de BCS. La curva discontinua corresponde al caso $m_0 = 0$ (100-0), es decir, ignorando los 2hCPs, donde se utilizaron los valores de $\tau = 6.014 \times 10^{-5}$ y $n/n_f = 1.0002$. b) Para el Pb se utilizaron $\tau = 6.10 \times 10^{-5}$ con $n/n_f = 1.0002$ [44]. Se muestran los datos experimentales para Sn (triángulo) y Pb (diamantes) tomados de P. Townsend y J. Sutton [58] y I. Giaever y K. Megerle [23]. El código utilizado para resolver numéricamente estas ecuaciones se puede consultar en el Apéndice B.

Para el caso 50-50, se tiene una coincidencia perfecta con la curva BCS, mientras que para el caso 100-0 donde se excluyen los 2hCPs, se observa una caída considerable del *gap*, que además de apartarse sustancialmente de la curva BCS también lo hace de los datos experimentales. Las curvas resultantes sugieren que la inclusión de 2hCPs es indispensable.

Capítulo 5

Propiedades Termodinámicas

En este capítulo se presentan los resultados de resolver las tres ecuaciones simultáneas del GBEC para determinar las propiedades termodinámicas de interés: la entropía y la capacidad calorífica. La mayoría de los modelos de gas BF no consideran la existencia, ni siquiera la presencia, de 2hCPs incluidos en igualdad con los 2eCPs. Nuestro objetivo es calcular la entropía y la capacidad calorífica de los SCs utilizando la teoría GBEC para contrastar con la teoría BCS y comparar con los datos experimentales.

5.1. Entropía

Los SCs en general tienen dos propiedades notables: i) una resistividad cero y ii) el efecto Meissner. Como el estado SC se puede analizar también con principios estadísticos, nos centramos en la entropía y la capacidad calorífica y se comparan los resultados con datos empíricos. El potencial termodinámico en el ensamble del gran canónico se presentó como

$$\Omega(T, \mathcal{V}, N, \mu) = -k_B T \ln \left\{ \text{Tr} \exp \left[-\beta (\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N}) \right] \right\}.$$

Con el hamiltoniano reducido diagonal (4.7) el gran potencial es explícitamente

$$\begin{aligned} \Omega(T, \mu, n_0, m_0) = & \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) [\epsilon - \mu - E(\epsilon)] \\ & - 2k_B T \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \ln \{ 1 + \exp[-\beta E(\epsilon)] \} \\ & + [E_+(0) - 2\mu] n_0 + k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \ln \{ 1 - \exp[-\beta \mathcal{E}_+(\eta)] \} \\ & + [2\mu - E_-(0)] m_0 + k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \ln \{ 1 - \exp[-\beta \mathcal{E}_-(\eta)] \}. \end{aligned}$$

Después de determinar el potencial termodinámico, la **entropía** se determina aplicando las relaciones termodinámicas habituales. Por lo tanto, para la entropía se usa la relación (que ofrece la entropía por unidad de volumen)

$$S(T, \mu, n_0, m_0)/L^3 = -\frac{\partial}{\partial T} (\Omega/L^3) \quad (5.1)$$

que al aplicarse el potencial termodinámico equivale a

$$S(T, \mu, n_0, m_0)/L^3 = - \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) [\epsilon - \mu - E(\epsilon)] \right. \\ \left. - 2k_B T \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \ln [1 + e^{-\beta E(\epsilon)}] \right. \\ \left. + [E_+(0) - 2\mu]n_0 + k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_+(\eta)}] \right. \\ \left. + [2\mu - E_-(0)]m_0 + k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_-(\eta)}] \right\}.$$

Se identifican los elementos dependientes de T :

$$E = E(T), \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad n_0 = n_0(T), \quad m_0 = m_0(T), \quad \mathcal{E}_\pm = \mathcal{E}_\pm(T),$$

así

$$\frac{S}{L^3} = - \left\{ \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \frac{\partial}{\partial T} [\epsilon - \mu - E(\epsilon)] \right. \\ \left. - 2k_B \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \ln [1 + e^{-\beta E(\epsilon)}] - 2k_B T \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \frac{\partial}{\partial T} \ln [1 + e^{-\beta E(\epsilon)}] \right. \\ \left. + n_0 \frac{\partial}{\partial T} [E_+(0) - 2\mu] + [E_+(0) - 2\mu] \frac{\partial n_0}{\partial T} \right. \\ \left. + k_B \int_0^\infty d\eta M(\eta) \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_+(\eta)}] + k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \frac{\partial}{\partial T} \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_+(\eta)}] \right. \\ \left. + m_0 \frac{\partial}{\partial T} [2\mu - E_-(0)] + [2\mu - E_-(0)] \frac{\partial m_0}{\partial T} \right. \\ \left. + k_B \int_0^\infty d\eta M(\eta) \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_-(\eta)}] + k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \frac{\partial}{\partial T} \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_-(\eta)}] \right\}.$$

Note que

$$\frac{\partial \beta}{\partial T} = - \frac{1}{k_B T^2} = - \frac{\beta}{T},$$

$$\frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta^2}} \left[(\mu - \epsilon) \frac{\partial \mu}{\partial T} + \frac{\Delta}{2} \left(f_+ \frac{1}{\sqrt{n_0}} \frac{\partial n_0}{\partial T} + f_- \frac{1}{\sqrt{m_0}} \frac{\partial m_0}{\partial T} \right) \right].$$

Si fijamos n_0, m_0 y μ , entonces $\frac{\partial n_0}{\partial T} = \frac{\partial m_0}{\partial T} = \frac{\partial \mu}{\partial T} = 0$ y así $\frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial \mathcal{E}_\pm}{\partial T} = 0$. Finalmente, la entropía del GBEC ofrece como expresión

$$S/L^3 = 2k_B \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \left\{ \ln [1 + e^{-\beta E}] + \frac{\beta E}{2} \cosh^{-1} \left(\frac{1}{2} \beta E \right) e^{-\frac{1}{2} \beta E} \right\} \\ - k_B \int_0^\infty d\eta M(\eta) \left\{ \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_+}] - \frac{\beta \mathcal{E}_+}{2} \sinh^{-1} \left(\frac{1}{2} \beta \mathcal{E}_+ \right) e^{-\frac{1}{2} \beta \mathcal{E}_+} \right\} \\ - k_B \int_0^\infty d\eta M(\eta) \left\{ \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_-}] - \frac{\beta \mathcal{E}_-}{2} \sinh^{-1} \left(\frac{1}{2} \beta \mathcal{E}_- \right) e^{-\frac{1}{2} \beta \mathcal{E}_-} \right\}. \quad (5.2)$$

Utilizando el cambio de variable presentado para el *gap* de energía, junto con las densidades de estados de fermiones y bosones (4.11), se puede escribir la entropía como una cantidad adimensional

$$\begin{aligned}
S/L^3 = & 2k_B \frac{(mE_f)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \left\{ \ln \left[1 + e^{-\beta E} \right] + \frac{\beta E}{2} \cosh^{-1} \left(\frac{1}{2}\beta E \right) e^{-\frac{1}{2}\beta E} \right\} \\
& - k_B \frac{2(mE_f)^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dy \sqrt{y} \left\{ \ln \left[1 - e^{-\beta \mathcal{E}_+} \right] - \frac{\beta \mathcal{E}_+}{2} \sinh^{-1} \left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+ \right) e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+} \right\} \\
& - k_B \frac{2(mE_f)^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dy \sqrt{y} \left\{ \ln \left[1 - e^{-\beta \mathcal{E}_-} \right] - \frac{\beta \mathcal{E}_-}{2} \sinh^{-1} \left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_- \right) e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-} \right\}.
\end{aligned}$$

Recordando que $n_f(T = 0) = \frac{(2mE_f)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}$ y definiendo $S_0/L^3 = k_B n_f(T = 0)$ en conjunto con $E_f = k_B T_f$, se obtiene la entropía normalizada

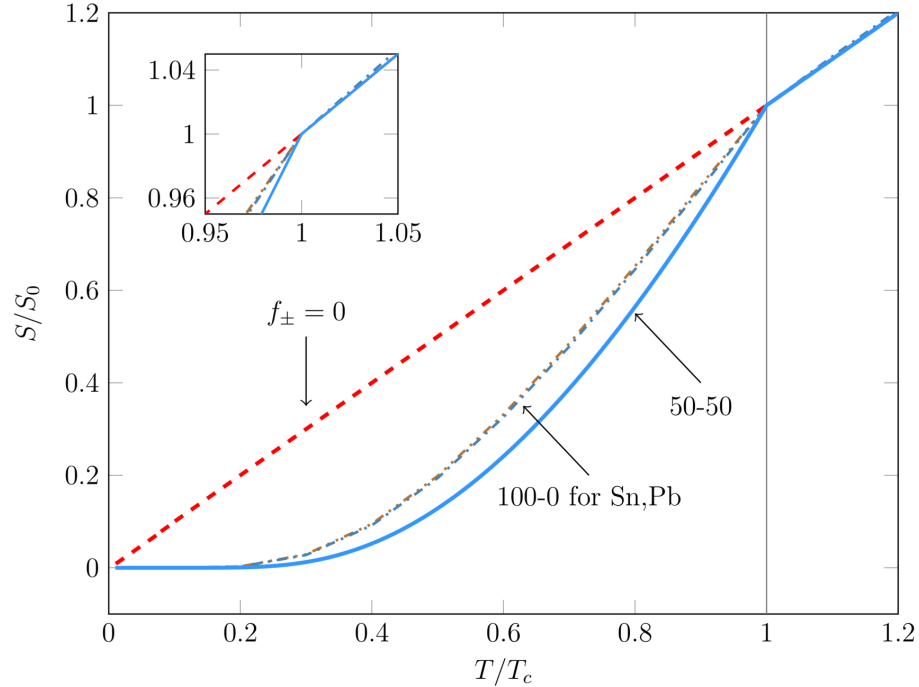


Figura 5.1: Entropía normalizada S/S_0 vs. T/T_c . Se muestran los casos 50-50 (curva completa) y 100-0 (curva punteada) para los SCs elementales Sn y Pb. También se muestra el caso sin interacción (línea discontinua) cuando $f_{\pm} = 0$. Se observa que para $T/T_c \geq 1$, S/S_0 tiene el comportamiento de un gas ideal. El recuadro muestra cómo todas las curvas más allá de $T = T_c$ convergen, haciendo que la entropía tenga un comportamiento lineal. Se puede consultar el código utilizado para integrar numéricamente a (5.3) en el Apéndice B.

$$\begin{aligned}
S/S_0 = & \frac{3}{2} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \left\{ \ln [1 + e^{-\xi}] + \frac{1}{2} \xi \cosh^{-1} \left(\frac{1}{2} \xi \right) e^{-\xi/2} \right\} \\
& - \frac{3}{\sqrt{2}} \int_0^\infty dy \sqrt{y} \left\{ \ln [1 - e^{-\xi_+}] + \frac{1}{2} \xi_+ \cosh^{-1} \left(\frac{1}{2} \xi_+ \right) e^{-\xi_+/2} \right\} \\
& - \frac{3}{\sqrt{2}} \int_0^\infty dy \sqrt{y} \left\{ \ln [1 - e^{-\xi_-}] + \frac{1}{2} \xi_- \cosh^{-1} \left(\frac{1}{2} \xi_- \right) e^{-\xi_-/2} \right\}
\end{aligned} \tag{5.3}$$

donde se han definido

$$\xi = \frac{1}{\tau T/T_c} \sqrt{(x - \tilde{\mu})^2 + \tilde{\Delta}^2},$$

$$\xi_+ = \frac{1}{\tau T/T_c} (y - 2 + \delta e + 2\tilde{\mu}) \quad \text{y} \quad \xi_- = \frac{1}{\tau T/T_c} (y + 2 + \delta e - 2\tilde{\mu}).$$

Se puede integrar numéricamente esta expresión y se realiza para los casos 50-50 y 100-0, el cual ignora los 2hCPs por completo.

En la Fig. 5.1 se muestra la solución numérica de (5.3). Note que alrededor de $T = T_c$ existe una discontinuidad en la derivada de la entropía, que se reconoce comúnmente como un cambio de fase, del estado normal al estado superconductor. Se observa que la teoría del GBEC reproduce correctamente el comportamiento de los SC por encima y por debajo de T_c . Se incluye el caso en que la interacción f_\pm se hace cero y reproduce la entropía de un gas ideal ternario. Tenga en cuenta la caída en la entropía cuando se incluyen los 2hCPs en el caso 50-50 así como la inclusión de 2hCPs da valores de entropía más bajos. Esto es equivalente a decir que al incluir los 2hCPs, conforme T disminuye a cero el sistema tiende a estabilizarse más rápidamente que si no están incluidos los huecos.

5.2. Capacidad calorífica

Las relaciones termodinámicas habituales ofrecen para la capacidad calorífica por unidad de volumen la relación

$$C_V(T, \mu, n_0, m_0)/L^3 = T \frac{\partial}{\partial T} (S/L^3) \tag{5.4}$$

Aplicando esta derivada a la entropía que se obtuvo en (5.2), se tiene

$$\begin{aligned}
C_V = & 2k_B T \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \ln [1 + e^{-\beta E}] + \frac{\beta E}{2} \cosh^{-1} \left(\frac{1}{2} \beta E \right) e^{-\frac{1}{2} \beta E} \right\} \\
& - k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_+}] - \frac{\beta \mathcal{E}_+}{2} \sinh^{-1} \left(\frac{1}{2} \beta \mathcal{E}_+ \right) e^{-\frac{1}{2} \beta \mathcal{E}_+} \right\} \\
& - k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_-}] - \frac{\beta \mathcal{E}_-}{2} \sinh^{-1} \left(\frac{1}{2} \beta \mathcal{E}_- \right) e^{-\frac{1}{2} \beta \mathcal{E}_-} \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_V = & 2k_B T \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \left\{ \frac{\partial}{\partial T} \ln [1 + e^{-\beta E}] \right. \\
& \left. + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial T} (\beta E e^{-\frac{1}{2}\beta E}) \cosh^{-1} (\frac{1}{2}\beta E) + \frac{1}{2} \beta E e^{-\frac{1}{2}\beta E} \frac{\partial}{\partial T} \cosh^{-1} (\frac{1}{2}\beta E) \right\} \\
& - k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \left\{ \frac{\partial}{\partial T} \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_+}] \right. \\
& \left. - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial T} (\beta \mathcal{E}_+ e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+}) \sinh^{-1} (\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+) - \frac{1}{2} \beta \mathcal{E}_+ e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+} \frac{\partial}{\partial T} \sinh^{-1} (\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+) \right\} \\
& - k_B T \int_0^\infty d\eta M(\eta) \left\{ \frac{\partial}{\partial T} \ln [1 - e^{-\beta \mathcal{E}_-}] \right. \\
& \left. - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial T} (\beta \mathcal{E}_- e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-}) \sinh^{-1} (\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-) - \frac{1}{2} \beta \mathcal{E}_- e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-} \frac{\partial}{\partial T} \sinh^{-1} (\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-) \right\}
\end{aligned}$$

Note que

$$\frac{\partial}{\partial T} \beta E = -\frac{\beta E}{T}, \quad \frac{\partial}{\partial T} \beta \mathcal{E}_+ = -\frac{\beta \mathcal{E}_+}{T}, \quad \frac{\partial}{\partial T} \beta \mathcal{E}_- = -\frac{\beta \mathcal{E}_-}{T},$$

debido a que

$$\frac{\partial n_0}{\partial T} = \frac{\partial m_0}{\partial T} = \frac{\partial \mu}{\partial T} = 0$$

y así $\frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial \mathcal{E}_\pm}{\partial T} = 0$. Por lo que

$$\begin{aligned}
C_V = & 2k_B \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \left\{ \left(\frac{1}{2}\beta E \right)^2 \cosh^{-1} (\frac{1}{2}\beta E) e^{-\frac{1}{2}\beta E} \right. \\
& \left. + \left(\frac{1}{2}\beta E \right)^2 \cosh^{-2} (\frac{1}{2}\beta E) \sinh (\frac{1}{2}\beta E) e^{-\frac{1}{2}\beta E} \right\} \\
& - k_B \int_0^\infty d\eta M(\eta) \left\{ - \left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+ \right)^2 \sinh^{-1} (\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+) e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+} \right. \\
& \left. - \left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+ \right)^2 \sinh^{-2} (\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+) \cosh (\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+) e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+} \right\} \\
& - k_B \int_0^\infty d\eta M(\eta) \left\{ - \left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_- \right)^2 \sinh^{-1} (\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-) e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-} \right. \\
& \left. - \left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_- \right)^2 \sinh^{-2} (\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-) \cosh (\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-) e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-} \right\}.
\end{aligned}$$

Utilizando las relaciones trigonométricas hiperbólicas apropiadas podemos llegar a la

forma más elegante de la capacidad calorífica del GBEC

$$\begin{aligned}
C_V/L^3 &= 2k_B \int_0^\infty d\epsilon N(\epsilon) \left(\frac{1}{2}\beta E\right)^2 \cosh^{-1}\left(\frac{1}{2}\beta E\right) [1 + \tanh\left(\frac{1}{2}\beta E\right)] e^{-\frac{1}{2}\beta E} \\
&+ k_B \int_0^\infty d\eta M(\eta) \left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+\right)^2 \sinh^{-1}\left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+\right) [1 + \coth\left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+\right)] e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_+} \\
&+ k_B \int_0^\infty d\eta M(\eta) \left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-\right)^2 \sinh^{-1}\left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-\right) [1 + \coth\left(\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-\right)] e^{-\frac{1}{2}\beta \mathcal{E}_-}.
\end{aligned} \tag{5.5}$$

Haciendo uso de los cambios de variables antes presentados, en conjunto con las densidades de estados (4.11) y definiendo la cantidad $C_f = k_B(mE_f)^{3/2}/\pi^2\hbar^3L^3$, se obtiene la capacidad calorífica normalizada

$$\begin{aligned}
C_V/C_f &= \sqrt{2} \int_0^\infty dx \sqrt{x} \left(\frac{1}{2}\xi\right)^2 \cosh^{-1}\left(\frac{1}{2}\xi\right) [1 + \tanh\left(\frac{1}{2}\xi\right)] e^{-\frac{1}{2}\xi} \\
&+ 2 \int_0^\infty dy \sqrt{y} \left(\frac{1}{2}\xi_+\right)^2 \sinh^{-1}\left(\frac{1}{2}\xi_+\right) [1 + \coth\left(\frac{1}{2}\xi_+\right)] e^{-\frac{1}{2}\xi_+} \\
&+ 2 \int_0^\infty dy \sqrt{y} \left(\frac{1}{2}\xi_-\right)^2 \sinh^{-1}\left(\frac{1}{2}\xi_-\right) [1 + \coth\left(\frac{1}{2}\xi_-\right)] e^{-\frac{1}{2}\xi_-}.
\end{aligned} \tag{5.6}$$

La Fig. 5.2 muestra a la capacidad calorífica. Existe un acuerdo apropiado entre este resultado y los datos cuando la temperatura está cerca de $T = 0$ para los casos 50-50 y 100-0, pero a medida que se aumenta la temperatura, la capacidad calorífica del caso 100-0 no tiene un acuerdo apropiado con los datos. En la entropía existe una discontinuidad en la derivada en $T = T_c$, lo que corresponde a un salto en la capacidad calorífica y como consecuencia se tiene una transición de fase del estado normal al estado SC conforme la temperatura disminuye [59]. Esto se aprecia en la Fig. 5.3 la cual muestra los casos 50-50 y 100-0 calculados al derivar numéricamente los resultados de la entropía. Este resultado coincide casi idénticamente con el que ofrece BCS, pero se recuerda que en el caso del GBEC se han incluido explícitamente los pares de Cooper de huecos.

La capacidad calorífica tiene un comportamiento lineal por encima de T_c asociado con un gas ideal ternario. Para el caso 50-50 se encuentra que se describe mejor a los SCs. También se muestra el resultado de la capacidad calorífica de BCS que revela el desacuerdo entre esta teoría y la GBEC, es decir, uno debe considerar la inclusión explícita de los 2hCPs y resolver tres ecuaciones simultáneas para la brecha de energía e introducir ese valor para cada T con el objetivo de calcular la capacidad calorífica y describir apropiadamente a los SCs.

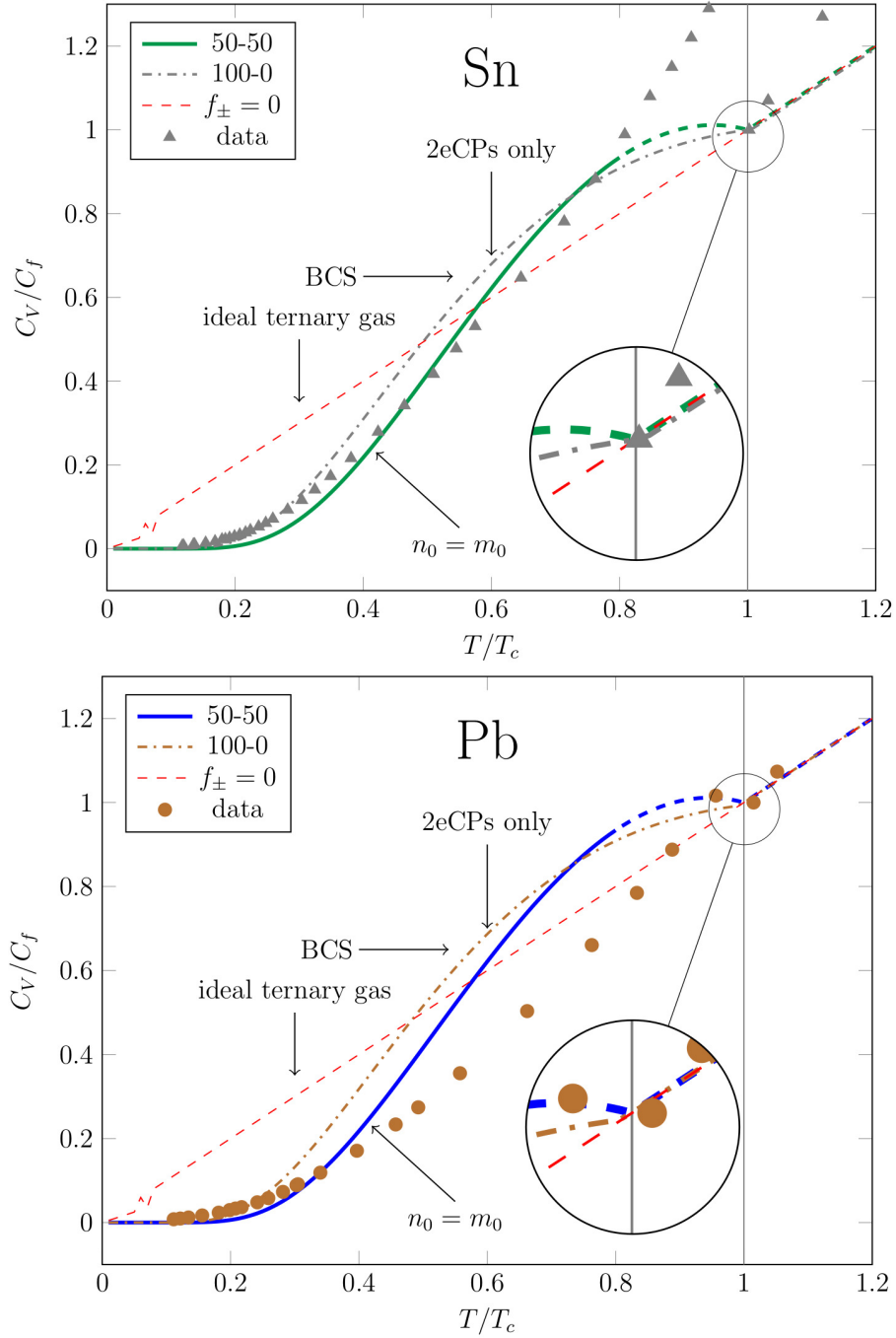


Figura 5.2: Capacidad calorífica C_V/C_f vs. T/T_c . Resultados para SCs elementales de estaño (Sn) y plomo (Pb) a 50-50 (curva completa), 100-0 (punto-rayado) y sin interacción (discontinuo rojo, donde $f_{\pm} = 0$). Comparación entre los valores adimensionales de BCS con los datos experimentales para SCs convencionales. Se ha señalado una parte de la línea perteneciente al caso 50-50 de manera discontinua debido a que los resultados obtenidos por la solución numérica en ese rango de temperaturas deben obtenerse por otro método de solución. Datos tomados Bryant y Keesom [60]. Se puede consultar el código utilizado para calcular numéricamente la integral (5.6) en el Apéndice B.

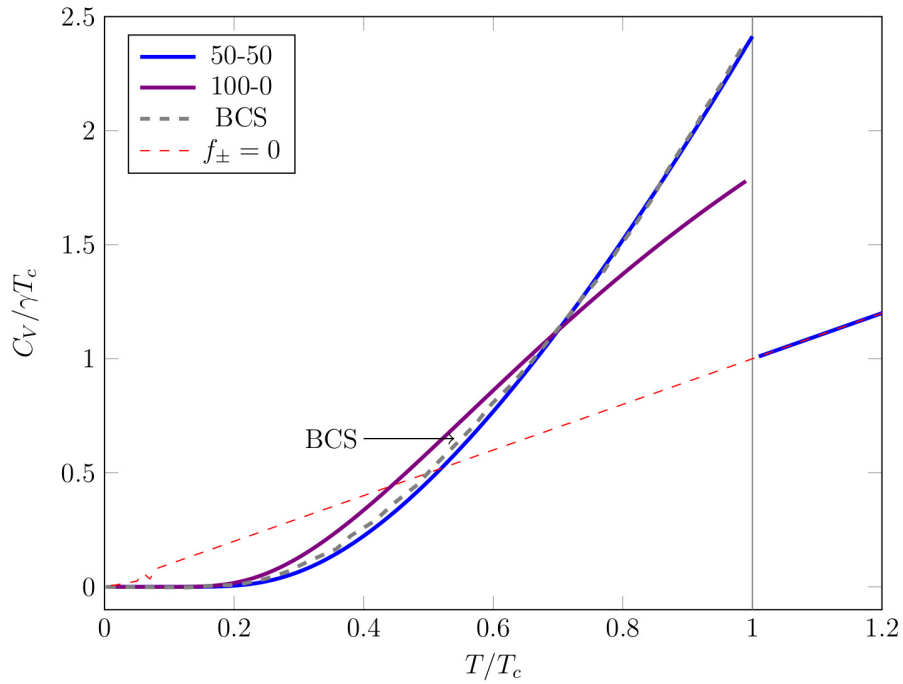


Figura 5.3: Capacidad calorífica $C_V/\gamma T_c$ vs. T/T_c . Resultados obtenidos al derivar numéricamente la entropía mostrada en la Fig. 5.1. Se incluye el caso 50-50 (azul) el 100-0 (violeta), BCS (discontinuo rojo) y sin interacción (discontinuo rojo). Datos de $C_V/\gamma T_c$ para BCS tomados de Tinkham [59]. Se puede consultar el código utilizado para calcular numéricamente esta capacidad calorífica en el Apéndice B.

Conclusión

Se obtienen tres ecuaciones trascendentales, acopladas, dependientes de la temperatura absoluta T que representan la teoría GBEC para un gas ternario. Estas ecuaciones son dos ecuaciones de tipo *gap* y una ecuación de densidad de número de partículas, las cuales confirman que la teoría BCS puede incluirse como un caso especial de la teoría GBEC cuando el número de pares de electrones condensados es igual al número de pares de huecos, en un caso que hemos llamado 50-50.

Se ha encontrado que el caso 100-0, que corresponde a la ausencia total de pares de huecos de Cooper, dejando sólo a los pares de electrones, no reproduce completamente los datos experimentales para SCs elementales y sólo describe el comportamiento de los datos empíricos para valores de T muy por debajo de T_c . La teoría del GBEC es en principio válida para todos los acoplamientos independientemente del modelo de interacción utilizado.

Las propiedades termodinámicas calculadas, cuya dependencia en la temperatura es trascendental, confirman que la teoría BCS queda incluida en la teoría GBEC cuando los pares de 2eCPs y 2hCPs son iguales. Se encuentra que el caso 100-0 no describe correctamente los datos empíricos para valores de $T \sim T_c$. Los resultados actuales de la capacidad calorífica parecen ser correctos, al menos para Sn y Pb, y mejoran los obtenidos por teoría BCS. Finalmente se obtiene una descripción aceptable de dos SCs elementales al incluir explícitamente los pares de huecos de Cooper.

Apéndice A

Sobre la construcción de las ecuaciones del GBEC

Se ha presentado en el Capítulo 4 la teoría GBEC, la cual surge al utilizar la mecánica estadística cuántica, construyendo primero el potencial termodinámico y minimizando la energía libre de Helmholtz con lo que se obtienen dos ecuaciones tipo *gap* para 2eCPs y 2hCPs y una ecuación de densidad de número de partículas. En este Apéndice se presentan los cálculos algebraicos a detalle para determinar los elementos presentados en ese capítulo.

A.1. Relaciones de conmutación y anticonmutación

La teoría de la condensación de Bose-Einstein generalizada describe en detalle las propiedades de un sistema de muchas partículas (un fluido cuántico) utilizando la mecánica estadística cuántica. Se asume que el sistema está constituido por tres clases de partículas: electrones desligados (fermiones), pares de Cooper de electrones (2eCPs) y pares de Cooper de huecos (2hCPs), ambos postulados como bosones. También se considera que no existen interacciones entre los electrones desligados o los huecos con los pares bosónicos. Se dejan de lado las interacciones entre 2eCPs y 2hCPs así como las de tipo electrón-hueco. Así, sólo se consideran las interacciones entre fermiones y 2eCPs o fermiones y 2hCPs debido a la descomposición natural de estos pares bosónicos en sus constituyentes (electrones o huecos) o la formación elemental de ambos tipos de pares.

Se asume que el sistema de muchos fermiones se encuentra en un espacio de volumen macroscópico L^3 . Los estados de una sola partícula, cuyos constituyentes individuales están desligados, son descritos por funciones de onda

$$\psi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}, \sigma) = L^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \delta_{s,\sigma} \quad (\text{A.1})$$

que están caracterizadas por valores del vector de onda (de fermiones) \mathbf{k} y su proyección de espín σ sobre el eje z . Estos estados tienen energías $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$, donde m es la masa efectiva del electrón. Los estados de una partícula de 2eCPs, considerando su movimiento desde el centro de masa, también son descritos por ondas planas

$$\varphi_{\mathbf{K}}(\mathbf{R}) = L^{-3/2} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \quad (\text{A.2})$$

que están caracterizados por el valor \mathbf{K} del momento del centro de masa (CMM) total de los pares de electrones. Estos estados tienen energías $E_+(K) = E_+(0) + \hbar^2 K^2 / 2(2m)$, donde

$2m$ es la masa del par de Cooper y $E_+(K)$ es la energía fenomenológica de formación del par. Note que el segundo elemento de la energía posee una relación de dispersión cuadrática.

Se postula la presencia de pares de Cooper de huecos cuyo estado de una partícula del CMM tiene la forma de (A.2) pero referido a valores del CMM de 2hCPs, cuyas energías son $E_-(K) = E_-(0) - \hbar^2 K^2/2(2m)$, donde $E_-(0)$ es la energía de los pares de huecos. Note que se asume a la masa del par como $2m$, la misma que un par de electrones. Por simplicidad se asume que tanto los 2eCPs como los 2hCPs tienen solamente un estado ligado interno.

Se utilizará el método de representación de segunda cuantización junto con condiciones de frontera (de Born-Von Karman) sobre las paredes del recipiente contenedor de volumen L^3 para las funciones de onda del sistema de muchos fermiones. Estas condiciones se satisfacen automáticamente cuando el vector de onda \mathbf{k} de los fermiones desacoplados y el vector \mathbf{K} de los bosones individuales toman valores que corresponden a los nodos de una red simple en el k -espacio recíproco, donde la celda unitaria tiene un volumen $(2\pi/L)^3$ [61].

En la representación de segunda cuantización se tienen los operadores de creación (aniquilación) para sus estados de una partícula con momento \mathbf{k} y proyección de espín σ , denotados por $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ ($\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$) respectivamente, los cuáles satisfacen las relaciones de anticonmutación [18]

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

Se designa por $\hat{b}_{\mathbf{K}}^\dagger$ ($\hat{b}_{\mathbf{K}}$) a los operadores de creación (aniquilación) de segunda cuantización de pares de Cooper de electrones (2eCPs) para el estado de una partícula en el CMM con vector de onda \mathbf{K} . Se postula que son operadores para bosones, es decir, satisfacen las relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [\hat{b}_{\mathbf{K}}, \hat{b}_{\mathbf{K}'}^\dagger] &\equiv \hat{b}_{\mathbf{K}} \hat{b}_{\mathbf{K}'}^\dagger - \hat{b}_{\mathbf{K}'}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{K}} = \delta_{\mathbf{K},\mathbf{K}'} \\ [\hat{b}_{\mathbf{K}}^\dagger, \hat{b}_{\mathbf{K}'}^\dagger] &= 0 \\ [\hat{b}_{\mathbf{K}}, \hat{b}_{\mathbf{K}'}] &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Note que estos operadores difieren de los operadores de pares de BCS definidos como $\hat{b}_{\mathbf{kK}} \equiv \hat{a}_{\mathbf{k}_2,\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k},\uparrow}$ y $\hat{b}_{\mathbf{kK}}^\dagger \equiv \hat{a}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2,\downarrow}^\dagger$, para los cuales sólo el caso $\mathbf{K} = 0$ fue discutido por ellos. Sus relaciones de conmutación son

$$[\hat{b}_{\mathbf{kK}}, \hat{b}_{\mathbf{k}'\mathbf{K}'}^\dagger] = (1 - n_{\mathbf{K}/2-\mathbf{k},\downarrow} - n_{\mathbf{K}/2+\mathbf{k},\uparrow}) \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \quad (\text{A.5})$$

donde $n_{\mathbf{K}/2\pm\mathbf{k},\sigma} \equiv \hat{a}_{\mathbf{K}/2\pm\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{K}/2\pm\mathbf{k},\sigma}$ son los operadores de número de Fermi. Como (A.5) no son precisamente reglas de conmutación de Bose, se ha dicho correctamente [9] que los operadores de BCS no representan explícitamente bosones verdaderos.

Similarmente para (A.4) los operadores de creación (aniquilación) de segunda cuantización para 2hCPs, $\hat{c}_{\mathbf{K}}^\dagger$ ($\hat{c}_{\mathbf{K}}$) en su estado de un sólo hueco para el vector de onda \mathbf{K} del

CCM son postulados como operadores de Bose y satisfacen las relaciones

$$\begin{aligned} [\hat{c}_{\mathbf{K}}, \hat{c}_{\mathbf{K}'}^\dagger] &= \delta_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} \\ [\hat{c}_{\mathbf{K}}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{K}'}^\dagger] &= 0 \\ [\hat{c}_{\mathbf{K}}, \hat{c}_{\mathbf{K}'}] &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Es precisamente la inclusión de los pares de huecos junto con los pares de electrones que hacen el presente un **modelo completo bosón-fermión** (BF). Hasta donde se sabe [62], no se ha podido obtener con éxito la construcción de operadores de creación y aniquilación de pares de Cooper que obedezcan las relaciones de conmutación de Bose formados por operadores de fermiones $\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger$ ($\hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}$). Sin embargo, como se ha mostrado, estas partículas ($2e/2h$ CPs) obedecen la distribución de Bose.

A.2. Diagonalización del hamiltoniano

Inicialmente se definen

$$\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu, \quad E_0 = [E_+(0) - 2\mu]N_0 + [2\mu - E_-(0)]M_0.$$

Recuerde que se omiten las interacciones entre fermiones y los pares de Cooper excitados, por lo que se trabaja con el hamiltoniano reducido (4.6), y sólo se toman en cuenta las interacciones de tipo BF entre los electrones desapareados y los pares condensados.

El operador $\hat{\mathcal{H}}_{\text{red}}$ es cuadrático en el operador de fermiones y pueden determinarse sus eigenestados y eigenvalores, pues sólo se necesita transformar los operadores de creación y aniquilación de electrones $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ en operadores de cuasi-partículas $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma}$ por medio de una transformación de Bogoliubov-Valatin [33]. Específicamente

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} &= u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma} + 2\sigma v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}, -\sigma}^\dagger \\ \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + 2\sigma v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}, -\sigma} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

donde $\sigma = \pm 1/2$ es el espín de la partícula, y los operadores $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma}$ siguen las relaciones de anticonmutación presentadas en (A.3).

Sustituyendo (A.7) en el hamiltoniano reducido se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{red}} &= E_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + 2\sigma v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}, -\sigma}) (u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}\sigma} + 2\sigma v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}, -\sigma}^\dagger) \\ &+ \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [E_+(\mathbf{K}) - 2\mu] \hat{b}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [2\mu - E_-(\mathbf{K})] \hat{c}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{K}} \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} [\sqrt{n_0} f_+(\mathbf{k}) + \sqrt{m_0} f_-(\mathbf{k})] \times \\ &\quad \left[(u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}, \downarrow}) (u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}, \uparrow}) \right. \\ &\quad \left. + (u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}, \downarrow} - v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger) (u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}, \uparrow} + v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger) \right] \end{aligned}$$

Definiendo

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sqrt{n_0}f_+(\mathbf{k}) + \sqrt{m_0}f_-(\mathbf{k})$$

y al expandir y reorganizar los términos se obtiene

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{red}} &= E_0 + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [E_+(\mathbf{K}) - 2\mu] \hat{b}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [2\mu - E_-(\mathbf{K})] \hat{c}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{K}} \\ &+ \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} \left[u_{\mathbf{k}}^2 \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} + 4\sigma^2 v_{\mathbf{k}}^2 \left(1 - \hat{a}_{-\mathbf{k}, -\sigma}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}, -\sigma} \right) + 2\sigma u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}, -\sigma}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k}, -\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} \right) \right] \\ &+ \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \left[(u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \left(\hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow} \right) + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(1 - \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}, \downarrow} - \hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}, \uparrow} \right) \right] \\ \hat{\mathcal{H}}_{\text{red}} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\xi_{\mathbf{k}}(u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) - 2\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}] \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} \\ &+ 2 \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sigma \left[\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \right] \left(\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}, -\sigma}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k}, -\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} \right) \\ &+ \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [E_+(\mathbf{K}) - 2\mu] \hat{b}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [2\mu - E_-(\mathbf{K})] \hat{c}_{\mathbf{K}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{K}} \\ &+ 2 \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}) + E_0 \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Para diagonalizar $\hat{\mathcal{H}}_{\text{red}}$ se debe cumplir la condición de diagonalización

$$\xi_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) = 0.$$

Si se define la energía

$$E_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) - 2\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}$$

y se sustituye en la condición anterior se obtiene

$$u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{E_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}}{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}.$$

La condición $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ ofrece

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{E_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}}{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} \right], \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{E_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}}{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} \right].$$

Al sustituir estos valores en la condición de diagonalización se obtiene el *gap* de energía

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} \quad (\text{A.9})$$

por lo que

$$u_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}} \right], \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}} \right]. \quad (\text{A.10})$$

Sustituyendo (A.9) y (A.10) en el $\hat{\mathcal{H}}_{\text{red}}$ se obtiene el hamiltoniano reducido diagonal

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\text{red}} = & \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) + E_0 \\ & + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [E_+(\mathbf{K}) - 2\mu] \hat{b}_{\mathbf{K}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [2\mu - E_-(\mathbf{K})] \hat{c}_{\mathbf{K}}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{K}} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

A.3. Eigenestados y eigenvalores

Los eigenestados de (A.11) se pueden enumerar con el conjunto $\{n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}\}$, donde $n_{\mathbf{k}\sigma}$ caracteriza el estado de un electrón y puede tomar el valor de 0 o 1, mientras que el número de ocupación $N_{\mathbf{K}}$ de un 2eCP (un bosón) o el número de ocupación $M_{\mathbf{K}}$ de un 2hCP pueden tomar valores de 0 a infinito.

Los eigenestados de (A.11) serán

$$|n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}, \sigma} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \right)^{n_{\mathbf{k}\sigma}} \prod_{\mathbf{K} \neq 0} \frac{1}{\sqrt{N_{\mathbf{K}}!}} \left(\hat{b}_{\mathbf{K}}^{\dagger} \right)^{N_{\mathbf{K}}} \prod_{\mathbf{K} \neq 0} \frac{1}{\sqrt{M_{\mathbf{K}}!}} \left(\hat{c}_{\mathbf{K}}^{\dagger} \right)^{M_{\mathbf{K}}} |0\rangle \quad (\text{A.12})$$

donde $|0\rangle$ es el estado de vacío para cuasi-electrones generados por el operador $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ y simultáneamente para 2eCPs y 2hCPs, definiendo

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} |0\rangle = \hat{b}_{\mathbf{K}} |0\rangle = \hat{c}_{\mathbf{K}} |0\rangle = 0.$$

Los eigenvalores del hamiltoniano reducido serán

$$\begin{aligned} E_{\{n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}\}} = & E_0 + \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} \\ & + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [E_+(\mathbf{K}) - 2\mu] N_{\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{K} \neq 0} [2\mu - E_-(\mathbf{K})] M_{\mathbf{K}}. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

La dinámica del sistema queda entonces definida por la ecuación de valores propios

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{red}} |n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}\rangle = E_{\{n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}\}} |n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}\rangle$$

Apéndice B

Códigos implementados para la solución numérica

En este Apéndice se presentan los programas elaborados con el software de cómputo científico Wolfram Mathematica (versión 11.3.0, Student Edition) para la solución de las ecuaciones utilizadas en este trabajo.

El siguiente código es usado para **calcular el *gap* de energía de la teoría de BCS**, normalizado con el *gap* a $T = 0$, $\Delta(T)/\Delta(0)$. Se obtiene como función de la temperatura T/T_c al resolver la ecuación (2.27).

```
In[1]:= kB := 8.617332 10^(-5) (* [eV/K] constante de Boltzmann *)
h := 6.582118 10^(-16) (* [eV s] hbar *)
Tc := 0.875 (* [K] para estanio Sn, Kittel *)
TD := 329 (* [K] temperatura de Debye *)
wD := kB TD/h (* [rad/s] frecuencia de Debye, Kittel *)
NOV := ((Log[(2 Exp[EulerGamma] h wD)/(Pi kB Tc)])^(-1)
(* Han, pp 636 *)
Delta0 := 2 h wD Exp[-(1/NOV)]
(* Han, pp 634 *)
((2 Delta0)/(kB Tc)) (* gap-to-Tc ratio: 3.528 *)

In[2]:= BCSgap = {};

CapitalDelta0 := CapitalDelta /.
FindRoot[ 1/NOV ==
NIntegrate[ 1/Sqrt[x^2 + CapitalDelta^2]
Tanh[(h wD)/(2 kB Tc) 1/0.01 Sqrt[x^2 + CapitalDelta^2]],
{x, 0, 1}], {CapitalDelta, 0.01}, Method -> "Newton"]

Do[{Delta := CapitalDelta /.
FindRoot[ 1/NOV ==
NIntegrate[ 1/Sqrt[x^2 + CapitalDelta^2]
Tanh[(h wD)/(2 kB Tc) 1/T Sqrt[x^2 + CapitalDelta^2]],
{x, 0, 1}], {CapitalDelta, 0.01}, Method -> "Newton"],
Print[T, " ", Delta/CapitalDelta0],
AppendTo[BCSgap, {T, Delta/CapitalDelta0}]],
```

```

{T, 0.01, 1, 0.01}]

ListPlot[BCSgap, Joined -> True,
  AxesLabel -> {"T/Tc", "CapitalDelta/CapitalDelta(0)"}]

Export["BCSgap.dat", BCSgap]

```

El siguiente código *calcula el gap de energía y el potencial químico para el *crossover* BCS-Bose*, normalizado con la energía de Fermi E_F a $T = 0$ (ecuaciones 3.4 y 3.5) como función del parámetro $x = 1/k_F a_s$.

```

In[3]:= BCSBecDelta[x_] :=
  FindRoot[{
    Pi x == NIntegrate[
      1/Sqrt[u] - Sqrt[u]/Sqrt[(u - mu)^2 + Delta^2],
      {u, 0, 10^6}],
    1 == 3/4 NIntegrate[
      Sqrt[u] (1 - (u - mu)/Sqrt[(u - mu)^2 + Delta^2]),
      {u, 0, 10^6}], {{Delta, 0.25}, {mu, 1}}][[1, 2]]

BCSBecmu[x_] :=
  FindRoot[{
    Pi x == NIntegrate[
      1/Sqrt[u] - Sqrt[u]/Sqrt[(u - mu)^2 + Delta^2],
      {u, 0, 10^6}],
    1 == 3/4 NIntegrate[
      Sqrt[u] (1 - (u - mu)/Sqrt[(u - mu)^2 + Delta^2]),
      {u, 0, 10^6}], {{Delta, 0.25}, {mu, 1}}][[2, 2]]

In[4]:= crossoverDelta = Table[{x, BCSBecDelta[x]},
  {x, Range[-3, 4, 0.1]}];

crossovermu = Table[{x, BCSBecmu[x]}, {x, Range[-3, 4, 0.1]}];

ListPlot[{crossoverDelta, crossovermu}, Joined -> True,
  PlotRange -> {{-3, 4}, {-5, 3}}, AspectRatio -> Automatic]

Export["crossoverDelta.dat", crossoverDelta]

Export["crossovermu.dat", crossovermu]

```

El siguiente código se usa para calcular el *gap* de energía del GBEC suponiendo $n_0 = m_0$, correspondiente al caso 50-50 para Sn y Pb. El resultado se muestra en la Figura 4.3.

```

In[5]:= (* Values of G, de and Tau of GBEC for Sn or Pb *)
G := 10^(-4) (* adim *)
de := 1.0 10^(-3) (* adim *)
Tau := 6.014 10^(-5) (* for Sn, Tc/TF, adim *)
(* Tau := 6.10 10^(-5) (* for Pb, Tc/TF, adim *) *)

In[6]:= gapz[T_] := CapitalDelta /.
FindRoot[ {1 - Mu + de/2 ==
G NIntegrate[
Sqrt[x]/Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]
Tanh[1/(2 Tau T) Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]],
{x, 1, 1 + de}],
1.0002 == (3 CapitalDelta^2)/(8 G) +
3 Sqrt[2] NIntegrate[
Sqrt[y] (Exp[(y + 2 + de - 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,
{y, 0, Infinity}] -
3 Sqrt[2] NIntegrate[
Sqrt[y] (Exp[(y - 2 + de + 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,
{y, 0, Infinity}] +
3/4 NIntegrate[
Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]),
{x, 0, 1}] +
3/4 NIntegrate[
Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]
Tanh[1/(2 Tau T)
Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]]),
{x, 1, 1 + de}] +
3/4 NIntegrate[
Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]),
{x, 1 + de, Infinity}]],
{{CapitalDelta, 1}, {Mu, 0.5}}, Method -> "Newton"]

gap0 = gapz[0.001]

In[7]:= findroot :=
FindRoot[{1 - Mu + de/2 ==
G NIntegrate[
Sqrt[x]/Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]

```



```

Tanh[1/(2 Tau T) Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]],
  {x, 1, 1 + de}],
1.0002 == (3 CapitalDelta^2)/(8 G) +
3 Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[y] (Exp[(y + 2 + de - 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,
  {y, 0, Infinity}] -
3 Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[y] (Exp[(y - 2 + de + 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,
  {y, 0, Infinity}] +
3/4 NIntegrate[
  Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
  Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]), {x, 0, 1}] +
3/4 NIntegrate[
  Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
  Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2] Tanh[1/(2 Tau T)
  Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]]), {x, 1, 1 + de}] +
3/4 NIntegrate[
  Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
  Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]),
  {x, 1 + de, Infinity}]],
{{CapitalDelta, 1}, {Mu, 0.5}}, Method -> "Newton"]

```

```
In[8]:= gap2eCP = {};
```

```
Do[{gap := CapitalDelta /. findroot, Print[T, " ", gap/gap0],
  AppendTo[gap2eCP, {T, gap/gap0}]}, {T, 0.01, 1, 0.01}]
```

```
ListPlot[gap2eCP (*, Joined -> True *),
  AxesLabel -> {"T/Tc", "CapitalDelta/CapitalDelta0"}]
```

```
Export["gap2eCP_Sn.dat", gap2eCP]
(* in case, "gap2eCP_Pb.dat" *)
```

El siguiente código **calcula la entropía en el GBEC**, ec. (5.3), para el caso 50-50.

```
In[9]:= (* Values of G, de and Tau of GBEC *)
G := 10^(-4) (* adim *)
de := 10^(-3) (* adim *)
Tau := 7.64 10^(-6) (* Tc/Tf adim *)
```

```
In[10]:= Delta[T_] := CapitalDelta /.
  FindRoot[{de == G NIntegrate[
  Sqrt[x]/Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]
  Tanh[1/(2 Tau T) Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]],
```

```

      {x, 1 - de, 1 + de}],
1 == 3 Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[y] (Exp[(y + 2 + de - 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,
  {y, 0, Infinity}] -
3 Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[y] (Exp[(y - 2 + de + 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,
  {y, 0, Infinity}] +
3/4 NIntegrate[
  Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
    Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]),
  {x, 0, 1 - de}] +
3/4 NIntegrate[
  Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
    Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2] Tanh[1/(2 Tau T)
    Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]]),
  {x, 1 - de, 1 + de}] +
3/4 NIntegrate[
  Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
    Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]),
  {x, 1 + de, Infinity}]],
{{CapitalDelta, 1.5}, {Mu, 1}}, Method -> "Newton"]

```

```
CapitalDelta1 = Delta[1]
```

```
Mu[T_] := Mu /.
```

```

FindRoot[{de == G NIntegrate[
  Sqrt[x]/Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]
  Tanh[1/(2 Tau T) Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]],
  {x, 1 - de, 1 + de}],
1 == 3 Sqrt[2]
NIntegrate[
  Sqrt[y] (Exp[(y + 2 + de - 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,
  {y, 0, Infinity}] -
3 Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[y] (Exp[(y - 2 + de + 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,
  {y, 0, Infinity}] +
3/4 NIntegrate[
  Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
    Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]),
  {x, 0, 1 - de}] +
3/4 NIntegrate[Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
  Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2] Tanh[1/(2 Tau T)
  Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]]),

```

```

      {x, 1 - de, 1 + de}] +
3/4 NIntegrate[
  Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
    Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]),
  {x, 1 + de, Infinity}],
{{CapitalDelta, 1.5}, {Mu, 1}}, Method -> "Newton"]

Mu1 = Mu[1]

S[T_] := 3/2 NIntegrate[
  Sqrt[x] (Log[1 + Exp[-(1/(Tau T)) Abs[x - Mu1]]] +
    1/(2 Tau T) Abs[x - Mu1] Cosh[1/(2 Tau T)
      Abs[x - Mu1]]^-1 Exp[-(1/(2 Tau T)) Abs[x - Mu1]]),
  {x, 0, 1 - de}] +
3/2 NIntegrate[
  Sqrt[x] (Log[1 + Exp[-(1/(Tau T))
    Sqrt[(x - Mu1)^2 + CapitalDelta1^2]]) +
    1/(2 Tau T) Sqrt[(x - Mu1)^2 + CapitalDelta1^2]
    Cosh[1/(2 Tau T)
      Sqrt[(x - Mu1)^2 + CapitalDelta1^2]]^-1
    Exp[-(1/(2 Tau T))
      Sqrt[(x - Mu1)^2 + CapitalDelta1^2]]),
  {x, 1 - de, 1 + de}] +
3/2 NIntegrate[
  Sqrt[x] (Log[1 + Exp[-(1/(Tau T)) Abs[x - Mu1]]] +
    1/(2 Tau T) Abs[x - Mu1] Cosh[1/(2 Tau T)
      Abs[x - Mu1]]^-1 Exp[-(1/(2 Tau T)) Abs[x - Mu1]]),
  {x, 1 + de, Infinity}] -
3/Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[y] (Log[1 - Exp[-(1/(Tau T)) (y - 2 + de + 2 Mu1)]] -
    1/(2 Tau T) (y - 2 + de + 2 Mu1)
    Sinh[1/(2 Tau T) (y - 2 + de + 2 Mu1)]^-1
    Exp[-(1/(2 Tau T)) (y - 2 + de + 2 Mu1)]),
  {y, 0, Infinity}] -
3/Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[y] (Log[1 - Exp[-(1/(Tau T)) (y + 2 + de - 2 Mu1)]] -
    1/(2 Tau T) (y + 2 + de - 2 Mu1)
    Sinh[1/(2 Tau T) (y + 2 + de - 2 Mu1)]^-1
    Exp[-(1/(2 Tau T)) (y + 2 + de - 2 Mu1)]),
  {y, 0, Infinity}]

S0 = S[1]

ln[11]:= SS[T_] :=

```

```

3/2 NIntegrate[
  Sqrt[x] (Log[1 + Exp[-(1/(Tau T)) Abs[x - Muu]]] +
    1/(2 Tau T) Abs[x - Muu] Cosh[1/(2 Tau T)
      Abs[x - Muu]]^-1 Exp[-(1/(2 Tau T)) Abs[x - Muu]]),
    {x, 0, 1 - de}] +
3/2 NIntegrate[
  Sqrt[x] (Log[
    1 + Exp[-(1/(Tau T)) Sqrt[(x - Muu)^2 + Gap^2]]] +
    1/(2 Tau T) Sqrt[(x - Muu)^2 + Gap^2] Cosh[1/(2 Tau T)
      Sqrt[(x - Muu)^2 + Gap^2]]^-1 Exp[-(1/(2 Tau T))
        Sqrt[(x - Muu)^2 + Gap^2]]), {x, 1 - de, 1 + de}] +
3/2 NIntegrate[
  Sqrt[x] (Log[1 + Exp[-(1/(Tau T)) Abs[x - Muu]]] +
    1/(2 Tau T) Abs[x - Muu] Cosh[1/(2 Tau T)
      Abs[x - Muu]]^-1 Exp[-(1/(2 Tau T)) Abs[x - Muu]]),
    {x, 1 + de, Infinity}] -
3/Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[y] (Log[1 - Exp[-(1/(Tau T)) (y - 2 + de + 2 Muu)]] -
    1/(2 Tau T) (y - 2 + de + 2 Muu) Sinh[
      1/(2 Tau T) (y - 2 + de + 2 Muu)]^-1 Exp[-(1/(
        2 Tau T)) (y - 2 + de + 2 Muu)]), {y, 0, Infinity}] -
3/Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[y] (Log[1 - Exp[-(1/(Tau T)) (y + 2 + de - 2 Muu)]] -
    1/(2 Tau T) (y + 2 + de - 2 Muu) Sinh[
      1/(2 Tau T) (y + 2 + de - 2 Muu)]^-1 Exp[-(1/(
        2 Tau T)) (y + 2 + de - 2 Muu)]), {y, 0, Infinity}]

In[12]:= (* Calculate entropy S(T)/S_0 in the 50-50 symmetry *)
Entropy5050 = {};

Do[{Gap := Delta[T], Muu := Mu[T], SS0 := SS[T]/S0,
  Print[T, " ", Gap, " ", Muu, " ", SS0],
  AppendTo[Entropy5050, {T, SS0}]}, {T, 0.01, 1.5, 0.01}]

ListPlot[Entropy5050(*,Joined -> True*),
  AxesLabel -> {"T/Tc", "S/S0"}]

Export["Entropy5050_00.dat", Entropy5050 ]

```

El siguiente código **calcula la capacidad calorífica para el GBEC** que integra numéricamente a (5.6).

```

In[13]:= (* Values of G, de and Tau of GBEC for Sn *)
G := 10^(-4) (* adim *)
de := 10^(-3) (* adim *)
Tau := 6.10 10^(-5) (* for Sn, Tc/TF, adim *)

In[14]:= Delta[T_] := CapitalDelta /.
FindRoot[{1 - Mu + de/2 == G NIntegrate[
Sqrt[x]/Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]
Tanh[1/(2 Tau T)
Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]], {x, 1, 1 + de}],
1.0002 == (3 CapitalDelta^2)/(8 G) +
3 Sqrt[2] NIntegrate[
Sqrt[y] (Exp[(y + 2 + de - 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,
{y, 0, Infinity}] -
3 Sqrt[2] NIntegrate[
Sqrt[y] (Exp[(y - 2 + de + 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,
{y, 0, Infinity}] +
3/4 NIntegrate[Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]),
{x, 0, 1}] +
3/4 NIntegrate[Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2] Tanh[1/(2 Tau T)
Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]]),
{x, 1, 1 + de}] +
3/4 NIntegrate[Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]),
{x, 1 + de, Infinity}]],
{{CapitalDelta, 1}, {Mu, 0.5}}, Method -> "Newton"]

CapitalDelta1 = Delta[1]

Mu[T_] := Mu /.
FindRoot[{1 - Mu + de/2 == G NIntegrate[
Sqrt[x]/Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2] Tanh[1/(2 Tau T)
Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]], {x, 1, 1 + de}],
1.0002 == (3 CapitalDelta^2)/(8 G) +
3 Sqrt[2] NIntegrate[
Sqrt[y] (Exp[(y + 2 + de - 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,
{y, 0, Infinity}] -
3 Sqrt[2] NIntegrate[
Sqrt[y] (Exp[(y - 2 + de + 2 Mu)/(Tau T)] - 1)^-1,

```

```

    {y, 0, Infinity}] +
3/4 NIntegrate[Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
  Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]),
  {x, 0, 1}] +
3/4 NIntegrate[Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
  Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2] Tanh[1/(2 Tau T)
  Sqrt[(x - Mu)^2 + CapitalDelta^2]]),
  {x, 1, 1 + de}] +
3/4 NIntegrate[Sqrt[x] (1 - (x - Mu)/
  Abs[x - Mu] Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu]]),
  {x, 1 + de, Infinity}]],
{{CapitalDelta, 1}, {Mu, 0.5}}, Method -> "Newton"]

Mu1 = Mu[1]

Cv[T_] := Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[x] (1/(2 Tau T) Abs[x - Mu1])^2 (1 +
  Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu1]]) Cosh[1/(2 Tau T)
  Abs[x - Mu1]]^-1 Exp[-(1/(2 Tau T)) Abs[x - Mu1]] ,
  {x, 0, 1 - de}] +
Sqrt[2] NIntegrate[Sqrt[x] (1/(2 Tau T)
  Sqrt[(x - Mu1)^2 + CapitalDelta1^2])^2 (1 +
  Tanh[1/(2 Tau T)
  Sqrt[(x - Mu1)^2 + CapitalDelta1^2]]) Cosh[1/(2 Tau T)
  Sqrt[(x - Mu1)^2 + CapitalDelta1^2]]^-1
  Exp[-(1/(2 Tau T)) Sqrt[(x - Mu1)^2 +
  CapitalDelta1^2]] , {x, 1 - de, 1 + de}] +
Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[x] (1/(2 Tau T) Abs[x - Mu1])^2 (1 +
  Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Mu1]]) Cosh[1/(2 Tau T)
  Abs[x - Mu1]]^-1 Exp[-(1/(2 Tau T))
  Abs[x - Mu1]] , {x, 1 + de, Infinity}] +
2 NIntegrate[
  Sqrt[y] (1/(2 Tau T) (y - 2 + de + 2 Mu1))^2 (1 +
  Coth[1/(2 Tau T) (y - 2 + de + 2 Mu1)])
  Sinh[1/(2 Tau T) (y - 2 + de + 2 Mu1)]^-1
  Exp[-(1/(2 Tau T)) (y - 2 + de + 2 Mu1)] ,
  {y, 0, Infinity}] +
2 NIntegrate[
  Sqrt[y] (1/(2 Tau T) (y + 2 + de - 2 Mu1))^2 (1 +
  Coth[1/(2 Tau T) (y + 2 + de - 2 Mu1)])
  Sinh[1/(2 Tau T) (y + 2 + de - 2 Mu1)]^-1
  Exp[-(1/(2 Tau T)) (y + 2 + de - 2 Mu1)] ,

```

```

      {y, 0, Infinity}]

Cf = Cv[1]

In[15]:= CCv[T_] := Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[x] (1/(2 Tau T) Abs[x - Muu])^2
  (1 + Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Muu]])
  Cosh[1/(2 Tau T) Abs[x - Muu]]^-1
  Exp[-(1/(2 Tau T)) Abs[x - Muu]] , {x, 0, 1 - de}] +
  Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[x] (1/(2 Tau T) Sqrt[(x - Muu)^2 + Gap^2])^2
  (1 + Tanh[1/(2 Tau T) Sqrt[(x - Muu)^2 + Gap^2]])
  Cosh[1/(2 Tau T) Sqrt[(x - Muu)^2 + Gap^2]]^-1
  Exp[-(1/(2 Tau T)) Sqrt[(x - Muu)^2 + Gap^2]] ,
  {x, 1 - de, 1 + de}] +
  Sqrt[2] NIntegrate[
  Sqrt[x] (1/(2 Tau T) Abs[x - Muu])^2
  (1 + Tanh[1/(2 Tau T) Abs[x - Muu]])
  Cosh[1/(2 Tau T) Abs[x - Muu]]^-1
  Exp[-(1/(2 Tau T)) Abs[x - Muu]] ,
  {x, 1 + de, Infinity}] +
  2 NIntegrate[
  Sqrt[y] (1/(2 Tau T) (y - 2 + de + 2 Muu))^2
  (1 + Coth[1/(2 Tau T) (y - 2 + de + 2 Muu)])
  Sinh[1/(2 Tau T) (y - 2 + de + 2 Muu)]^-1
  Exp[-(1/(2 Tau T)) (y - 2 + de + 2 Muu)] ,
  {y, 0, Infinity}] +
  2 NIntegrate[
  Sqrt[y] (1/(2 Tau T) (y + 2 + de - 2 Muu))^2
  (1 + Coth[1/(2 Tau T) (y + 2 + de - 2 Muu)])
  Sinh[1/(2 Tau T) (y + 2 + de - 2 Muu)]^-1
  Exp[-(1/(2 Tau T)) (y + 2 + de - 2 Muu)] ,
  {y, 0, Infinity}]

In[16]:= Capacity2eCP = {};

Do[{Gap := Delta[T], Muu := Mu[T], CvCf := CCv[T]/Cf,
  Print[T, " ", Gap, " ", Muu, " ", CvCf],
  AppendTo[Capacity2eCP, {T, CvCf}]}, {T, 0.01, 1.2, 0.01}]

ListPlot[Capacity2eCP(*,Joined -> True*),
  AxesLabel -> {"T/Tc", "C_V/C_f"}]

Export["Capacity2eCP_Pb_00.dat", Capacity2eCP ]

```

Apéndice C

Sobre los detalles algebraicos de BCS

En este Apéndice se presentan los detalles algebraicos requeridos para establecer claramente los resultados de la teoría de BCS mostrada en el Capítulo 2.3. Para determinar los operadores que se mezclan con $\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}$, se establece su ecuación de movimiento usando la ecuación de Heisenberg

$$i\hbar \frac{d\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}}{dt} = [\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}, \hat{\mathcal{H}}] = \xi_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} - \Delta \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}$$

Así, $\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}$ tiene que combinarse linealmente con $\hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}$ para determinar unos nuevos operadores. La transformación general debe ser

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} &= p_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} + q_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \\ \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} &= v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}.\end{aligned}$$

Para preservar todas las propiedades algebraicas de $\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}$ y $\hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}$, se requiere que $\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}$ y $\hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ satisfagan las relaciones de anticonmutación

$$\begin{aligned}\{\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}\} &= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, & \{\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}\} &= \{\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}\} = 0 \\ \{\hat{\beta}_{\mathbf{k}}, \hat{\beta}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}\} &= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, & \{\hat{\beta}_{\mathbf{k}}, \hat{\beta}_{\mathbf{k}'}\} &= \{\hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \hat{\beta}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}\} = 0 \\ \{\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\beta}_{\mathbf{k}'}\} &= \{\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}, \hat{\beta}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}\} &= \{\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \hat{\beta}_{\mathbf{k}'}\} &= \{\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger}, \hat{\beta}_{\mathbf{k}'}^{\dagger}\} = 0\end{aligned}$$

Las dos últimas relaciones de anticonmutación en la primera y en la segunda líneas y la segunda y la tercera relaciones de anticonmutación en la tercera línea se satisfacen automáticamente. La primer relación de anticonmutación en la primera y segunda líneas llevan a las siguientes relaciones entre los coeficientes de la transformación

$$|p_{\mathbf{k}}|^2 + |q_{\mathbf{k}}|^2 = 1, \quad |u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$$

Tanto la primera como la cuarta relación de anticonmutación en la tercer línea llevan a la misma relación:

$$u_{\mathbf{k}}^* q_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^* p_{\mathbf{k}} = 0,$$

La relación anterior se puede satisfacer si $p_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}^*$ y $q_{\mathbf{k}} = -v_{\mathbf{k}}^*$. La transformación es finalmente

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}}^* \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \\ \hat{\beta}_{\mathbf{k}}^{\dagger} &= v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}\end{aligned}\tag{C.1}$$

Con $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ que satisfacen la condición

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1.$$

La transformación en (C.1) es conocida como la transformación de Bogoliubov para fermiones.

Bibliografía

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, “Possible high- T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system,” *Z. für Physik B*, vol. 64, pp. 189–193, 1986.
- [2] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle, “Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, pp. 3969–3973, 1995.
- [3] D. S. Jin, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell, “Collective excitations of a Bose-Einstein condensate in a dilute gas,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, pp. 420–423, 1996.
- [4] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, and J. Akimitsu, “Superconductivity at 39 K in magnesium diboride,” *Nature*, vol. 410, pp. 63–64, 2001.
- [5] A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, V. Ksenofontov, and S. I. Shylin, “Conventional superconductivity at 203 K at high pressures in the sulfur hydride system,” *Nature*, vol. 525, pp. 73–76, 2015.
- [6] E. Snider, N. Dasenbrock-Gammon, R. McBride, M. Debessai, H. Vindana, K. Venkatasamy, K. V. Lawler, A. Salamat, and R. P. Dias, “Room-temperature superconductivity in a carbonaceous sulfur hydride,” *Nature*, vol. 586, pp. 373–377, 2020.
- [7] S. Chatrchyan and et al., “Observation of a new boson at a mass of 125 GeV with the CMS experiment at the LHC,” *Phys. Lett. B*, vol. 716, pp. 30–61, 2012.
- [8] P. C. W. Chu, “High-temperature superconductors,” *Sci. Am.*, vol. 273, pp. 162–165, 1995.
- [9] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, “Theory of superconductivity,” *Phys. Rev.*, vol. 108, pp. 1175–1204, 1957.
- [10] I. Chávez, M. Grether, and M. de Llano, “Is BCS related with BEC?,” *J. Supercond. Novel Mag.*, vol. 28, pp. 309–313, 2015.
- [11] I. Chávez, L. A. García, M. de Llano, and M. Grether, “Role of superconducting energy gap in extended BCS-bose crossover theory,” *Int. J. Mod. Phys. B*, vol. 31, p. 1745004, 2017.
- [12] C. A. Regal, M. Greiner, S. Giorgini, M. Holland, and D. S. Jin, “Momentum distribution of a Fermi gas of atoms in the BCS-BEC crossover,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, p. 250404, 2005.

-
- [13] I. Chávez, L. A. García, M. Grether, M. de Llano, and V. V. Tolmachev, “Extended BCS-bose crossover,” *J. Supercond. Novel Mag.*, vol. 31, pp. 631–637, 2017.
- [14] I. Chávez, L. A. García, M. de Llano, and M. Grether, “BCS-Bose crossover theory extended with hole cooper pairs,” *Int. J. Mod. Phys. B*, vol. 31, p. 1745013, 2017.
- [15] I. Chávez, L. A. García, M. Grether, M. de Llano, and V. V. Tolmachev, “Two-electron and two-hole Cooper pairs in superconductivity,” *J. Supercond. Novel Magn.*, vol. 32, pp. 1633–1638, 2018.
- [16] H. K. Onnes *Akad. van Wetenschappen (Amsterdam)*, vol. 14, p. 113, 1911.
- [17] M. Sakata, Y. Nakamoto, K. Shimizu, T. Matsuoka, and Y. Ohishi, “Superconducting state of Ca-VII below a critical temperature of 29 K at a pressure of 216 GPa,” *Phys. Rev. B*, vol. 83, p. 220512, 2011.
- [18] F. Han, *A Modern Course in the Quantum Theory of Solids*. World Scientific, 2013.
- [19] W. Meissner and R. Ochsenfeld *Naturwiss*, vol. 21, p. 787, 1933.
- [20] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons, 2004.
- [21] B. S. Deaver and W. M. Fairbank, “Experimental evidence for quantized flux in superconducting cylinders,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 7, pp. 43–46, 1961.
- [22] R. Doll and M. Näbauer, “Experimental proof of magnetic flux quantization in a superconducting ring,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 7, pp. 51–52, 1961.
- [23] I. Giaever and K. Megerle, “Study of superconductors by electron tunneling,” *Phys. Rev.*, vol. 122, pp. 1101–1111, 1961.
- [24] W. S. Corak, B. B. Goodman, C. B. Satterthwaite, and A. Wexler, “Atomic heats of normal and superconducting vanadium,” *Phys. Rev.*, vol. 102, pp. 656–661, 1956.
- [25] C. J. Gorter and H. Casimir *Physik. Z.*, vol. 35, p. 963, 1934.
- [26] F. London and H. London *Proc. R. Soc. A*, vol. A149, p. 71, 1935.
- [27] V. L. Ginzburg and L. D. Landau *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, vol. 20, p. 1064, 1950.
- [28] L. D. Landau, “On the theory of phase transitions,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, vol. 7, pp. 19–32, 1937.
- [29] G. M. Eliashberg, “Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor,” *Sov. Phys. JETP*, vol. 11, no. 3, pp. 696–702, 1960.
- [30] Y. J. Uemura and et al., “Universal correlations between T_c and $\frac{n_s}{m^*}$ (carrier density over effective mass) in high- T_c cuprate superconductors,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 62, pp. 2317–2320, 1989.

Bibliografía

- [31] L. N. Cooper, “Bound electron pairs in a degenerate Fermi gas,” *Phys. Rev.*, vol. 104, pp. 1189–1190, 1956.
- [32] G. Rickayzen, *Theory of superconductivity*. Interscience Publishers, 1965.
- [33] N. N. Bogoljubov, “On a new method in the theory of superconductivity,” *Il Nuovo Cim.*, vol. 6, pp. 794–805, 1958.
- [34] J. Annett, *Superconductivity, Superfluids, and Condensates*. Oxford University Press, 2004.
- [35] R. Friedberg and T. D. Lee, “Gap energy and long-range order in the boson-fermion model of superconductivity,” *Phys. Rev. B*, vol. 40, pp. 6745–6762, 1989.
- [36] D. E. Farrell, R. G. Beck, M. F. Booth, C. J. Allen, E. D. Bukowski, and D. M. Ginsberg, “Superconducting effective-mass anisotropy in $Tl_2Ba_2CaCu_2O_x$,” *Phys. Rev. B*, vol. 42, pp. 6758–6761, 1990.
- [37] N. Mott, “Polaron models of high-temperature superconductivity,” *Physica C*, vol. 205, pp. 191 – 205, 1993.
- [38] D. M. Eagles, “Possible pairing without superconductivity at low carrier concentrations in bulk and thin-film superconducting semiconductors,” *Phys. Rev.*, vol. 186, pp. 456–463, 1969.
- [39] A. J. Leggett, “Cooper pairing in spin-polarized Fermi systems,” *J. Phys. (Paris) Colloq.*, vol. 41, pp. C7–19, 1980.
- [40] M. Randeria, J.-M. Duan, and L.-Y. Shieh, “Bound states, Cooper pairing, and Bose condensation in two dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 62, pp. 981–984, 1989.
- [41] P. Nozières and S. Schmitt-Rink *J. Low Temp. Phys.*, vol. 59, p. 195, 1985.
- [42] R. Haussmann, “Properties of a Fermi liquid at the superfluid transition in the crossover region between BCS superconductivity and Bose-Einstein condensation,” *Phys. Rev. B*, vol. 49, pp. 12975–12983, 1994.
- [43] M. R. Schafroth, “Theory of superconductivity,” *Phys. Rev.*, vol. 96, p. 1442, 1954.
- [44] M. Grether, M. de Llano, and V. V. Tolmachev, “A generalized BEC picture of superconductors,” *Int. J. Quant. Chem.*, vol. 112, pp. 3018–3024, 2012.
- [45] R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*. W. A. Benjamin, Inc., Publishers, 1964.
- [46] R. M. Carter, M. Casas, J. M. Getino, M. de Llano, A. Puente, H. Rubio, and D. M. van der Walt, “Coherence lengths for three-dimensional superconductors in the BCS-Bose picture,” *Phys. Rev. B*, vol. 52, pp. 16149–16154, 1995.
- [47] L. V. Keldysh and Y. V. Kopaev *Sov. Phys. Solid State*, vol. 6, p. 2219, 1965.

-
- [48] V. Popov, “Theory of a Bose gas produced by bound states of Fermi particles,” *Sov. Phys. JETP*, vol. 50, pp. 1034–1039, 1966.
- [49] J. Labbé, S. Barišić, and J. Friedel, “Strong-coupling superconductivity in V_3X type of compounds,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 19, pp. 1039–1041, 1967.
- [50] R. M. Quick, C. Esebbag, and M. de Llano, “Bcs theory tested in an exactly solvable fermion fluid,” *Phys. Rev. B*, vol. 47, p. 11512, 1993.
- [51] V. V. Tolmachev and S. V. Tiablikov, “A new method in the theory of superconductivity. ii,” *Sov. Phys. JETP*, vol. 34, pp. 46–50, 1958.
- [52] J. M. Blatt, S. T. Butler, and M. R. Schafroth, “Statistical mechanics of rotating buckets,” *Phys. Rev.*, vol. 100, pp. 481–495, 1955.
- [53] M. Casas, A. Rigo, M. de Llano, . Rojo, and M. A. Solís, “Bose-Einstein condensation with a BCS model interaction,” *Phys. Lett. A*, vol. 245, pp. 55–61, 1998.
- [54] M. de Llano and V. V. Tolmachev, “Multiple phases in a new statistical boson-fermion model of superconductivity,” *Physica A*, vol. 317, pp. 546–564, 2003.
- [55] V. V. Tolmachev, “Superconducting Bose-Einstein condensates of Cooper pairs interacting with electrons,” *Phys. Lett. A*, vol. 266, pp. 400–408, 2000.
- [56] M. de Llano and V. V. Tolmachev, “A generalized Bose-Einstein condensation theory of superconductivity inspired by Bogolyubov,” *Ukr. J. Phys.*, vol. 55, pp. 79–84, 2010.
- [57] Y. Nambu, “Quasi-particles and gauge invariance in the theory of superconductivity,” *Phys. Rev.*, vol. 117, pp. 648–663, 1960.
- [58] P. Townsend and J. Sutton, “Investigation by electron tunneling of the superconducting energy gaps in Nb, Ta, Sn, and Pb,” *Phys. Rev.*, vol. 128, pp. 591–595, 1962.
- [59] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity, 2nd ed.* Dover, 2004.
- [60] C. A. Bryant and P. H. Keesom, “Low-temperature specific heat of indium and tin,” *Phys. Rev.*, vol. 123, pp. 491–499, 1961.
- [61] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*. Saunders College Publishing, 1976.
- [62] M. de Llano, F. J. Sevilla, and S. Tapia, “Cooper pairs as bosons,” *Int. J. Mod. Phys. B*, vol. 20, pp. 2931–2939, 2006.

Índice alfabético

- capacidad calorífica del GBEC, 44
- capacidad calorífica C_V , 42
- condensación de Bose-Einstein BEC, 14
- conservación de la carga, 27
- constante de acoplamiento λ , 13
- crossover
 - BCS-BEC, 18
 - BCS-Bose, 20
 - extendido, 24
- cuanto de flujo magnético, 7
- densidad
 - de 2eCPs condensados n_0 , 28
 - de 2hCPs condensados m_0 , 28
 - de estados de electrones $N(\epsilon)$, 30
 - de estados de huecos $M(\epsilon)$, 30
- diamagnetismo, 3
- ecuación
 - de Heisenberg, 11, 65
 - de número, 21, 31
 - de valores propios, 29
 - del *gap*, 12, 21
 - tipo *gap*, 30
- ecuaciones
 - de Ginzburg-Landau, 8
 - de London, 8
 - del GBEC, 30
- efecto Meissner-Ochsenfeld, 6
- eigenestados $|n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}\rangle$, 53
- eigenvalores $E_{\{n_{\mathbf{k}\sigma}, N_{\mathbf{K}}, M_{\mathbf{K}}\}}$, 53
- elemental, superconductor, 4
- energía
 - de Debye $\hbar\omega_D$, 9
 - de excitación, 12
 - de Fermi E_F , 9
 - fenomenológica $E_{\pm}(K)$, 25
 - libre de Helmholtz F , 27
- entropía, 39
- entropía del GBEC $S(T, \mu, n_0, m_0)$, 40
- estadística
 - de Bose-Einstein, 14
 - de Fermi-Dirac, 12
- estado
 - base, 10
 - normal, 5
 - superconductor, 5
- fluido cuántico, 18
- fonón, 9
- gap
 - a $T = 0$, $\Delta(0)$, 13
 - de energía Δ , 7
 - de energía del GBEC, 30
 - de energía del GBEC $\Delta(T)$, 29
 - to T_c ratio, 13
- gas ternario, 24
- hamiltoniano
 - de interacción $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$, 10, 25
 - no perturbado $\hat{\mathcal{H}}_0$, 10, 25
 - para electrones, 10
 - reducido $\hat{\mathcal{H}}_{\text{red}}$, 28
 - reducido diagonal, 28, 53
- huecos, 24
- límite
 - de acoplamiento
 - débil, 32
 - fuerte, 33
 - de BCS, 20
- longitud de dispersión de onda- s a_s , 21
- modelo bosón-fermión BF, 23, 51
- número
 - de 2eCPs condensados N_0 , 28
 - de 2hCPs condensados M_0 , 28

- operador
- de 2eCP $\hat{b}_{\mathbf{K}}^{\dagger}, \hat{b}_{\mathbf{K}}$, 25
 - de 2hCP $\hat{c}_{\mathbf{K}}^{\dagger}, \hat{c}_{\mathbf{K}}$, 25
 - de electrones $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$, 25
 - de huecos $\hat{o}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, \hat{o}_{\mathbf{k}\sigma}$, 25
 - del número de partículas \hat{N} , 27
- par de Cooper
- de electrones 2eCP, 9
 - de huecos 2hCP, 24
- parámetro
- de acoplamiento, 31
 - de acoplamiento , 21
 - de orden $\psi(\mathbf{r})$, 8
- potencial
- químico μ , 10, 26
 - termodinámico Ω , 27
- principio de exclusión de Pauli, 9
- problema de Cooper, 9
- relación de dispersión, 30
- relaciones
- de anticonmutación, 65
- resistencia eléctrica nula, 3
- superconductividad, 3
- superconductor
- convencional, 5
 - de alta T_c , 5
 - de tipo I, 5
 - de tipo II, 6
 - exótico, 8
- superfluidez, 17
- temperatura
- absoluta T , 26
 - crítica T_c , 3, 14
 - de condensación, 16
- teoría
- de acoplamiento fuerte, 8
 - de BCS, 8
 - de la condensación de Bose-Einstein generalizada GBEC, 24
 - de los dos fluidos, 8
 - transformaciones de Bogoliubov, 11, 66
 - vértices de interacción $f_{\pm}(\mathbf{k})$, 25
 - volumen \mathcal{V} , 26