



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

EFFECTOS DE UN POTENCIAL PERIÓDICO  
UNIDIMENSIONAL EN LA ENERGÍA DE  
ENLACE DE UN PAR DE COOPER

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

Físico

PRESENTA:

Benjamín Isaías Balderas Suárez

TUTOR

Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez



## Hoja de datos del jurado

### 1. Datos del alumno

Balderas  
Suárez  
Benjamín  
Isaías  
56 76 71 78  
Universidad Nacional Autónoma de México  
Facultad de Ciencias  
Física  
307047812

### 2. Datos del tutor

Dr  
Francisco Javier  
Sevilla  
Pérez

### 3. Datos del sinodal 1

Dr  
Pablo  
de la Mora y Palomar  
Askinasy

### 4. Datos del sinodal 2

Dra  
Dr  
Chumin  
Wang  
Chen

### 5. Datos del sinodal 3

Dr  
Miguel Angel  
Solís  
Atala

### 6. Datos del sinodal 4

Marcela Dolores  
Grether  
González

### 7. Datos del trabajo escrito

Efectos de un potencial periódico unidimensional en la energía de enlace de un par de Cooper  
89 p  
2017

*A mis padres, Elia y Gregorio*

## **Agradecimientos**

A mis padres y hermanos, por su apoyo incondicional, por el esfuerzo y los sacrificios que hicieron para que yo lograra llegar a esta etapa en mi vida; por sus enseñanzas, su cariño y la motivación para seguir adelante a pesar de las adversidades. Les estaré eternamente agradecido.

A mi familia en general, por estar siempre a mi lado y compartir conmigo la felicidad de vivir; por confiar en mí, a veces más de lo que yo mismo.

A Yao, mi compañera, mi guía.

A todos mis compañeros y amigos, los que aún están, los que estuvieron y los que seguirán estando a mi lado, porque sin ellos aprender nuevas cosas no sería igual.

A mi asesor, Dr. Francisco Javier Sevilla, por darme la oportunidad de trabajar bajo su tutoría, por su tiempo, sus consejos y su gran disposición en todo momento.

A los doctores, Miguel Ángel Solís, Marcela Grether, Pablo de la Mora y Chumin Wang Chen por haber revisado mi trabajo y emitir siempre útiles y constructivos comentarios.

A la UNAM y en particular a la Facultad de Ciencias, por haberme formado no solo académicamente sino también como persona.

A Conacyt por la beca otorgada a través del programa “Ayudantes de Investigador Nacional” nivel III (Dr. Miguel Ángel Solís Atala exp. 6403).

# Índice general

0.1. Resumen . . . . .	1
<b>1. Introducción</b>	<b>3</b>
<b>2. Preliminares</b>	<b>8</b>
2.1. Gas de Fermi de electrones libres . . . . .	8
2.2. El modelo de Kronig-Penney . . . . .	11
2.3. El problema de Cooper . . . . .	16
2.3.1. Análisis de la aproximación $N(\epsilon) \approx N(E_F)$ . . . . .	21
<b>3. Efectos del potencial de Kronig-Penney</b>	<b>25</b>
3.1. La superficie de Fermi para un gas de Fermi en presencia de un potencial de Kronig-Penney en una dirección . . . . .	25
3.2. Densidad de partículas para un gas de Fermi en presencia de un potencial de Kronig-Penney en una dirección . . . . .	35
3.3. Energía de ligadura del par de Cooper en la presencia de potencial externo tipo Kronig-Penney en una dirección . . . . .	41
3.3.1. Caso: Momento de centro de masa igual a cero ( $\mathbf{K} = 0$ ) . . . . .	41
3.3.2. Caso: Momento de centro de masa distinto de cero ( $\mathbf{K} \neq 0$ ) . . . . .	55

<b>4. Conclusiones</b>	<b>57</b>
<b>A. Ecuación del gap superconductor a <math>T = 0</math></b>	<b>59</b>
A.1. Energía de condensación . . . . .	66
A.2. Solución del gap de BCS mediante una transformación canónica . . . . .	67
<b>B. La brecha a temperatura finita</b>	<b>74</b>
B.1. La temperatura crítica . . . . .	76

# Índice de figuras

1.1. Estructura para el superconductor de alta $T_c$ , $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ . Este es el primero que se descubrió con temperatura crítica por encima del punto de ebullición del Nitrógeno líquido (77 K). Se trata de un cuprato y en muchos trabajos se considera que únicamente la capa de óxido de cobre es superconductora. (Imagen tomada de [17]). . . . .	5
1.2. Temperaturas críticas de materiales. a) Compuestos de una sola fase en bulto. b) Materiales con heteroestructura bicapa. (Imagen tomada de [18]). . . . .	6
2.1. En el estado fundamental de un sistema de $N$ electrones libres, los niveles ocupados llenan completamente una esfera de radio $k_F$ . (Imagen modificada de [28]). . . . .	10
2.2. Potencial unidimensional de Kronig-Penney. . . . .	11
2.3. Gráfica de $(P/\alpha a) \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a)$ para $P = 3\pi/2$ . Los valores permitidos de la energía $\epsilon$ están dados por aquellos intervalos de $\alpha$ para los cuales la función se encuentra entre 1 y -1. . . . .	14
2.4. Energía en función del número de onda para el potencial de Kronig-Penney en la región extendida con $P = 3\pi/2$ . La línea roja punteada representa el caso del gas libre. . . . .	15
2.5. Se presentan las primeras cuatro bandas del espectro de energía en función del número de onda para el potencial de Kronig-Penney en la región entre $-\pi$ y $\pi$ con $P = 3\pi/2$ . . . . .	15
2.6. Formación de pares de Cooper mediante la interacción de los electrones con los iones de la red. . . . .	16
2.7. Sección transversal de volumen traslapado en el espacio $\mathbf{k}$ donde se señalan el momento del centro de masas ( $\mathbf{K}$ ) y la zona sombreada de los pares de Cooper (donde se conserva $\mathbf{K}$ ). . . . .	19
2.8. $E_r$ vs $1/\lambda$ , Energía de Fermi = 1 eV, $\hbar\omega_D = 0.001$ eV. . . . .	22
2.9. $E_r$ vs $1/\lambda$ , Energía de Fermi = 1 eV, $\hbar\omega_D = 0.01$ eV. . . . .	23

2.10. $E_r$ vs $1/\lambda$ , Energía de Fermi = 1 eV, $\hbar\omega_D = 0.1$ eV. . . . .	23
2.11. $E_r$ vs $1/\lambda$ , Energía de Fermi=1 eV, $\hbar\omega_D = 0.3$ eV. . . . .	24
3.1. Fermiones en un potencial periódico. (Imagen tomada de [34]). . . . .	25
3.2. Superficie de Fermi para $P = 0$ . . . . .	27
3.3. $P = 3\pi/2$ , $e_F = 9.8696$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada. . . . .	28
3.4. $P = 3\pi/2$ , $e_F = 39.4784$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada. . . . .	29
3.5. $P = 3\pi/2$ , $e_F = 88.8264$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada. . . . .	30
3.6. $P = 3\pi/2$ , $e_F = 157.914$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada. . . . .	31
3.7. $P = 3\pi/2$ , $e_F=15$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada. . . . .	32
3.8. $P = 3\pi/2$ , $e_F=50$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada. . . . .	33
3.9. $P = 3\pi/2$ , $e_F=100$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada. . . . .	34
3.10. Gráfica del espectro de energía en la dirección $z$ , $P = 0$ . No se presentan regiones prohibidas. . . . .	37
3.11. Densidad de partículas como función de la energía de Fermi para $P = 0$ . La gráfica obtenida numéricamente se traslapa con la que se obtiene por la expresión analítica $n' = \frac{1}{3\pi^2} e_F^{3/2}$ . . . . .	37
3.12. Gráficas de $n'$ vs $e_F$ para $P = 0$ , $P = 10$ , $P = 50$ y $P = 100$ . . . . .	38
3.13. Espectro de energía en la dirección $z$ . $P = 10$ . . . . .	39
3.14. Densidad de partículas como función de la energía de Fermi para $P = 10$ con energías de Fermi entre la primer y la segunda banda. La gráfica se curva para $e_F$ en la primera banda, se hace lineal en la región donde las energías de Fermi toman valores dentro del gap y vuelve a ser curva en la región de energías en la segunda banda. . . . .	39

3.15. Espectro de energías en la dirección $z$ , $P = 50$ . . . . .	40
3.16. Densidad de partículas como función de la energía de Fermi para $P = 50$ con energías de Fermi entre la primer y segunda banda. La región lineal es mucho más grande respecto a las regiones curvas debido a que el gap aumenta para valores grandes de $P$ . . . . .	40
3.17. a) Coordenadas esféricas en el espacio $\mathbf{k}$ y ejes cartesianos relacionados. b) Coordenadas cilíndricas en el espacio $\mathbf{k}$ y ejes cartesianos relacionados. . . . .	43
3.18. Gráficas de $e_r$ vs $1/\lambda$ con energía de Fermi en el límite de la primer banda para distintos valores de $P$ . . . . .	44
3.19. $P = 0$ , correspondiente a la curva de color rojo en la figura 3.18 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas, $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada $\approx 10$ . . . . .	45
3.20. $P = 1$ , correspondiente a la curva de color amarillo en la figura 3.18 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas, $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada $\approx 10$ . . . . .	45
3.21. $P = 10$ , correspondiente a la curva de color verde en la figura 3.18 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas, $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada $\approx 10$ . . . . .	46
3.22. $P = 100$ , correspondiente a la curva de color verde en la figura 3.18 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas, $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada $\approx 10$ . . . . .	47
3.23. $2e_F - e_r$ vs $P$ para $e_F = 10$ , $e_D = 1$ y $\lambda = 0.5$ . En el caso en que $a = 10 \text{ \AA}$ la energía de Fermi correspondiente es $E_F = 4346 \text{ K}$ y $E_D = 434.6 \text{ eV}$ . . . . .	48
3.24. $2e_F - e_r$ vs $P$ para $e_F = 30$ , $e_D = 1$ y $\lambda = 0.5$ . En el caso en que $a = 10 \text{ \AA}$ la energía de Fermi correspondiente es $E_F = 13038 \text{ K}$ y $E_D = 434.6 \text{ eV}$ . . . . .	48
3.25. $2e_F - e_r$ vs $P$ para $e_F = 10$ , $e_D = 1$ y $\lambda = 2$ . En el caso en que $a = 10 \text{ \AA}$ la energía de Fermi correspondiente es $E_F = 4346 \text{ K}$ y $E_D = 434.6 \text{ eV}$ . . . . .	49
3.26. $2e_F - e_r$ vs $P$ para $e_F = 10$ , $e_D = 1$ y $\lambda = 2$ . En el caso en que $a = 10 \text{ \AA}$ la energía de Fermi correspondiente es $E_F = 13038 \text{ K}$ y $E_D = 434.6 \text{ eV}$ . . . . .	50
3.27. Gráficas de $e_r$ vs $1/\lambda$ variando el valor de la energía de Fermi con $P = 10$ . La línea sólida junto a cada curva punteada corresponde a la curva obtenida mediante la expresión de Cooper. . . . .	51
3.28. $P = 10$ , $e_F = 10$ correspondiente a la curva amarilla en la figura 3.27 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas, $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada. . . . .	52

3.29. $P = 10, e_F = 15$ correspondiente a la curva amarilla en la figura 3.27 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas, $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada. . . . .	52
3.30. $P = 10, e_F = 25$ , correspondiente a la curva verde en la figura 3.27 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas, $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada. . . . .	53
3.31. $P = 10, e_F = 35$ , correspondiente a la curva verde en la figura 3.27 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas, $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada. . . . .	54
3.32. $2e_F + e_K$ vs $1/\lambda$ para diferentes valores de $K$ y $P = 0, e_F = 10, e_D = 1$ . . . . .	55
3.33. $2e_F + e_K$ vs $1/\lambda$ para diferentes valores de $K$ , $P = 10, e_F = 10, e_D = 1$ . . . . .	56
3.34. $2e_F + e_K$ vs $1/\lambda$ para diferentes valores de $P, K = 1, e_F = 10, e_D = 1$ . . . . .	56

## 0.1. Resumen

Motivados por el trabajo reciente [1], en el cual se estudian las propiedades termodinámicas en el superconductor de alta  $T_c$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ , y donde se propone que los pares de Cooper poseen una relación de dispersión lineal a lo largo de los planos donde ocurre la superconductividad y de bandas en la dirección perpendicular a éstos, es que en este trabajo se propone estudiar los efectos de la anisotropía inducida por la estructura de capas que caracteriza a los superconductores de alta  $T_c$ , en la formación de pares de Cooper.

La estructura de capas es modelada por un potencial periódico de Kronig-Penney en la dirección perpendicular a los planos que llamaremos  $z$  y consiste en una sucesión equidistante de barreras tipo delta de Dirac caracterizadas por una impermeabilidad  $P$ . Como consecuencia, el espectro de energías en la dirección  $z$ ,  $\epsilon_{k_z}$ , presenta una estructura de bandas.

Se estudian las características de la superficie de Fermi en la presencia de dicho potencial periódico observándose modificaciones en la forma y estructura respecto a la superficie que presenta un gas de fermiones libres (esférica en el espacio de momentos). Para un valor fijo de la impermeabilidad  $P$  distinto de cero, se encuentra que la superficie de Fermi puede ser discontinua, abierta o cerrada en la dirección  $z$  y el número de discontinuidades y la forma dependerá del valor de la energía de Fermi. Puntualmente, si la energía de Fermi se toma con un valor que se encuentra dentro de las regiones permitidas del espectro energético de Kronig-Penney, la superficie de Fermi es cerrada y el número de discontinuidades depende del número de bandas que hay hasta esa energía de Fermi. La superficie será abierta si la energía de Fermi se toma en la región prohibida del espectro energético de Kronig-Penney. Cuando el valor del parámetro  $P$  es cero se recupera la forma esférica que presenta la superficie para un gas de electrones libres.

Como preámbulo a la solución del problema de la energía de ligadura del par de Cooper, se estudia la dependencia de la densidad de partículas con la energía de Fermi para  $P \neq 0$ . Se observa que la dependencia de la densidad de partículas con la energía de Fermi es lineal cuando la energía de Fermi toma valores en la región prohibida del espectro de energías de Kronig-Penney y se curva en la región en donde la energía de Fermi se encuentra en la región permitida. Aquí nuevamente se corrobora que cuando el valor  $P$  es cero, se recupera la dependencia de la densidad de partículas con la energía de Fermi para un gas libre en donde  $n = \frac{1}{3\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} E_F \right)^{\frac{3}{2}}$ . También se encuentra que para un valor arbitrario de la energía de Fermi, la densidad de partículas disminuye a medida que el parámetro de impermeabilidad aumenta.

La contribución de este trabajo es encontrar la relación que existe entre el parámetro de acoplamiento y la energía de ligadura de un par de Cooper<sup>1</sup>, con momento de centro de masa igual a cero (para pares de Cooper generalizados con momento de centro de masa distinto de cero ver [2]), en el caso en que la superficie de Fermi se ve deformada debido a la presencia del potencial periódico. Se encuentra una relación entre parámetro de acoplamiento y la energía de ligadura del par, dicha expresión puede escribirse como el término que calcula Cooper (suponiendo que la densidad de estados,  $N(\epsilon)$ , es una constante igual a su valor sobre el nivel de Fermi) más un término adicional que incorpora los efectos del potencial de Kronig-Penney y que se anula cuando el valor de  $P = 0$ , recuperando así el resultado de Cooper. Se observa en dicha relación que para un valor fijo del parámetro de acoplamiento, al aumentar  $P$  aumenta la energía de ligadura. Cuando el valor de  $P$  se mantiene constante y distinto de cero la energía de ligadura disminuye, tendiendo a los valores predichos por Cooper conforme aumenta el valor de la energía de Fermi.

De manera preliminar, se inicia un análisis cuando el momento del centro de masa del par es distinto de cero. En este caso, como es bien sabido en la literatura [2, 3], cuando el valor del momento de centro de masa aumenta, la energía de ligadura disminuye y dicho resultado es reproducido aquí cuando  $P = 0$ . Para un valor fijo de  $P$  distinto de cero, se encuentra que la energía de ligadura del par es mayor que dicha energía predicha por el modelo de Cooper, sin embargo a medida que el valor del momento del centro de masa aumenta la energía de ligadura disminuye hasta incluso ser menor que la de Cooper. Además se observa que, para un valor fijo del momento del centro de masa, la energía de ligadura es menor que la de Cooper pero se vuelve mayor conforme incrementa el valor del parámetro de impermeabilidad  $P$ . Estas ideas nos motivan a estudiar, en algún trabajo posterior, los efectos del potencial en la relación de dispersión del par de Cooper.

---

<sup>1</sup>Un par de Cooper consiste en un par ligado de fermiones resultado de una interacción atractiva efectiva alrededor de la superficie o mar de Fermi. Ver Sección 2.3

# Capítulo 1

## Introducción

En 1911, tres años después de lograr licuar el Helio alrededor de 4K, Heike Kamerlingh Onnes [4] descubrió por primera vez la desaparición de la resistencia eléctrica en el Mercurio a una temperatura aproximada de 4.2 K. Posteriormente, en 1933 Meissner y Ochsenfeld [5] mostraron que los materiales que al ser enfriados presentan resistencia cero, también tienen la propiedad de expulsar campos magnéticos externos cuya intensidad es menor a la de un campo crítico  $H_c$ , por arriba del cual el material vuelve al estado “normal”. A este fenómeno se le conoce como “efecto Meissner”. A los materiales que presentan resistencia eléctrica nula y efecto Meissner se les conoce como superconductores.

Desde su descubrimiento hasta la actualidad, la superconductividad se ha convertido en un fenómeno de amplio interés tanto práctico como teórico en el mundo de la ciencia. A raíz de su detección se vislumbraron múltiples aplicaciones [6] pero, al tratarse de un efecto cuántico, no hubo grandes avances en el desarrollo teórico puesto que las herramientas con las que se disponía eran insuficientes hasta ese momento sin embargo, dos años después al hallazgo del efecto Meissner, este fue explicado por los hermanos London [7] mediante un modelo fenomenológico clásico, en el que se explica la forma que ha de tener el campo magnético a partir de las ecuaciones de Maxwell de la electrodinámica e imponiendo la definición de superconductividad, encontrando una longitud característica de penetración del campo magnético llamada “longitud de penetración”, que es función de la temperatura del material en el estado superconductor (ver detalles en Capítulo 8 de [8]). Posteriormente, en 1950 Ginzburg y Landau [9] generalizan la teoría fenomenológica de London considerando efectos cuánticos y relacionan la longitud de penetración con la densidad de partículas superconductoras definiendo una pseudo-función de onda e introducen por primera vez una relación entre una longitud de coherencia (que estima el alcance de los efectos cuánticos en la fase superconductor) y la longitud de penetración.

y la temperatura, para explicar de manera macroscópica la superconductividad. Pero fue hasta 1956 que Cooper [10] mostró que dos electrones, interactuando encima del mar de Fermi, en la presencia de un potencial atractivo, aunque fuera arbitrariamente débil, presentan un estado ligado que disminuye la energía del par y para 1957, John Bardeen, León Cooper y Robert Schrieffer [11] propusieron la primer teoría microscópica que dilucida la física de dicho fenómeno y fueron reconocidos con el premio Nobel de Física en el año 1972 por tal aportación. Esta teoría es conocida como la “teoría BCS de la superconductividad”.

La teoría BCS tuvo un gran éxito al lograr predecir los resultados experimentales observados en los superconductores llamados convencionales, como la existencia de una temperatura crítica, por debajo de la cual el material se encuentra en el estado superconductor, la existencia de una discontinuidad en el calor específico al pasar al estado superconductor, el efecto Meissner, el efecto isotópico, la existencia de una brecha en el espectro de energías de la fase superconductor. Particularmente predice que la razón entre el valor de la brecha superconductor y la energía asociada a la temperatura crítica es  $2\Delta/k_B T_c = 3.53$ <sup>1</sup>. No obstante, en 1986, J. G. Bednorz y K. A Muller [12] descubrieron un nuevo tipo de materiales superconductores hechos a base de óxido de cobre y con estructura de perovskita, con temperatura crítica de 36 K y los cuales no podían describirse satisfactoriamente con la teoría BCS. A raíz de este acontecimiento la comunidad científica ha hecho un gran esfuerzo tanto por encontrar nuevos materiales cuya temperatura crítica sea cada vez mayor, como de entender el mecanismo que da origen a la superconductividad en este tipo de materiales. En relación al primer tópico, una año después del descubrimiento hecho por Bednorz y Muller, Paul Chu logró conseguir una temperatura crítica de 93 K en YBaCuO y posteriormente se han encontrado muchos compuestos con óxido de cobre como elemento común con temperatura crítica récord de 133 K en HgBa<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>9</sub>. En 2008 se encontró otra familia de superconductores basados en planos que contienen hierro, con una temperatura crítica máxima conseguida de 56K en Sr<sub>0.5</sub>Sm<sub>0.5</sub>FeAsF [13, 14]. Recientemente, en 2015 M. I. Eremets y sus colaboradores [15] publicaron la existencia de superconductividad en sulfuro de hidrógeno a 190 K, la mayor temperatura crítica jamás observada, al someterlo a presiones mayores a los 200 GPa, no obstante, un trabajo teórico posterior sugiere que el origen de la superconductividad en este material no se debe a un mecanismo de acoplamiento desconocido (como en los cupratos o en los pníctidos) si no al efecto de la interacción de los electrones y los efectos anarmónicos de la red [16].

Muchos de los superconductores de alta temperatura crítica (SAT) que se han descubierto son materiales laminares que presentan planos superconductores, por ejemplo de CuO, separados entre sí por capas intermedias de distintos óxidos (ver figura 1.1). Esta estructura laminar podría ser el origen de la anisotropía que se observa en los SAT

---

<sup>1</sup>Un desarrollo de estos resultados se encuentra en los Apéndices A y B

y la cual juega un rol muy importante en las propiedades superconductoras de estos materiales. Otro tipo de experimentos más recientes [18] han demostrado, por ejemplo, que materiales superconductores mejoran su temperatura crítica en su superficie al ser dopados con algún material metálico; que se presenta superconductividad en la interfaz de ciertos materiales aún cuando uno es metal y el otro aislante y no son superconductores individualmente; o hasta en la interfaz de dos materiales que en principio son aislantes. Estas observaciones ponen de manifiesto el rol que juega la bidimensionalidad en la superconductividad. Las temperaturas críticas logradas mediante todo este tipo de experimentos son bastante prometedoras (ver Fig. 1.2) y vislumbran nuevas formas de entender y modelar el fenómeno de la superconductividad.

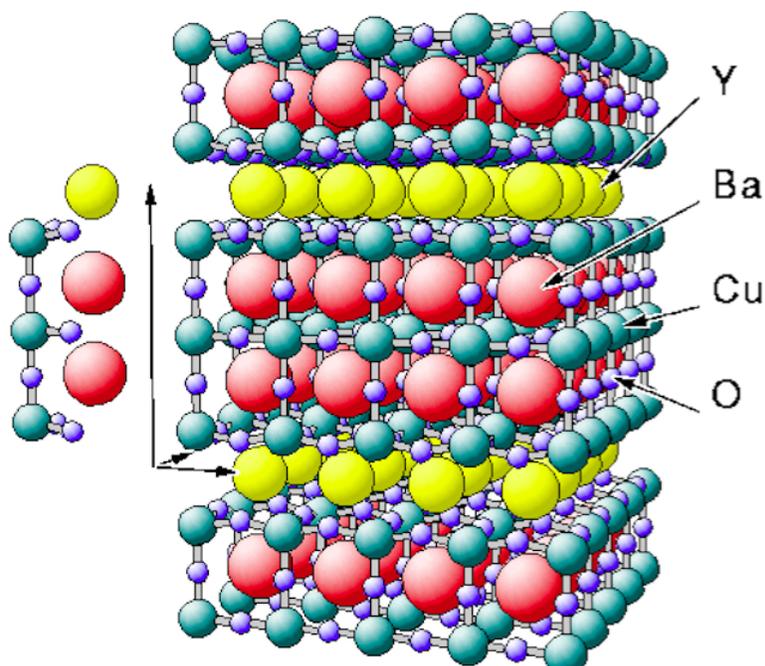


Figura 1.1: Estructura para el superconductor de alta  $T_c$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ . Este es el primero que se descubrió con temperatura crítica por encima del punto de ebullición del Nitrógeno líquido (77 K). Se trata de un cuprato y en muchos trabajos se considera que únicamente la capa de óxido de cobre es superconductor. (Imagen tomada de [17]).

En el ámbito teórico, el mecanismo microscópico que describe a los superconductores de alta  $T_c$  aún no es claro y existe un amplio debate al respecto [19, 20] sin embargo, parece haber un “consenso” en la comunidad científica al pensar que la formación de pares de Cooper sigue siendo la clave para esclarecer las cosas [21].

Motivados en lo anterior es que decidimos estudiar el efecto de confinamiento de un potencial periódico de tipo Kronig-Penney en la formación de pares de Cooper.

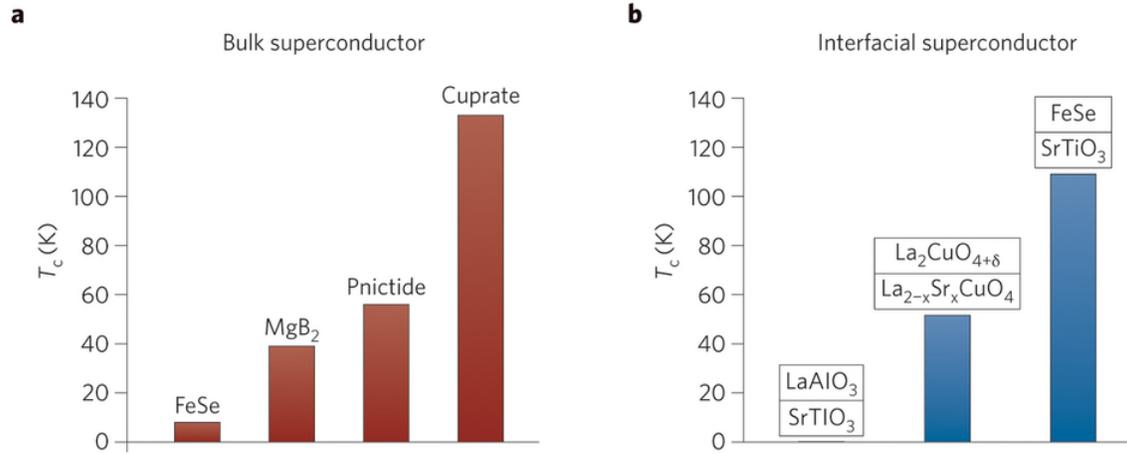


Figura 1.2: Temperaturas críticas de materiales. a) Compuestos de una sola fase en bulto. b) Materiales con heteroestructura bicapa. (Imagen tomada de [18]).

En el Capítulo 2 del presente trabajo se exponen los resultados preliminares. Se estudia el gas de Fermi de electrones libres. Partiendo de la ecuación de Schrödinger en tres dimensiones se muestra la forma de calcular la energía de Fermi y la superficie de Fermi como ya es bien conocido en la literatura [22, 23, 24]. Se discute el concepto de densidad de partículas, lo cual nos servirá para corroborar la validez de nuestros resultados. También se trata el problema Kronig-Penney, en el que se considera la existencia de un potencial periódico en una de las direcciones espaciales y se obtiene la ecuación de dispersión en el caso en que la barrera de potencial es infinitesimalmente angosta e infinitamente alta, es decir, deltas de Dirac. Se examina el concepto de “pares de Cooper”. Se estudia el problema de dos electrones acoplados mediante un potencial atractivo, se muestra que dicha interacción produce un estado ligado que disminuye la energía del sistema y se calculará la energía de ligadura del par considerando a la densidad de estados  $N(\epsilon)$  como una constante que depende de la energía de Fermi,  $N(E_F)$ , lo cual permite que esta cantidad sea sacada de las integrales y la energía pueda encontrarse analíticamente tal y como lo hizo Cooper en su artículo de 1956; así mismo se hará un análisis de los límites de dicha consideración.

En el Capítulo 3 se muestran los resultados obtenidos cuando se considera la existencia de un potencial periódico en la dirección  $z$  en el espacio de momentos. Se muestra la forma que adquieren las superficies de Fermi en función de la energía y de la intensidad de las deltas de Dirac. De igual forma se hace un estudio de la modificación en la densidad de partículas y finalmente, se describe el cambio que se presenta en la energía de ligadura en los casos en que el momento de centro de masa es igual a cero y distinto de cero.

En el Capítulo 4 se concluye que los efectos que tiene la presencia del potencial periódico en la superficie de Fermi, en la densidad de partículas y en la energía de ligadura del par de Cooper son cruciales y que el valor del parámetro de impenetrabilidad y de la energía de Fermi juegan papeles importantes.

Finalmente en los Apéndices A y B se presentan otros resultados obtenidos por la teoría BCS de forma similar a como se hace en las referencias [25, 8, 26] y se realizan algunos cálculos que muchas veces se omiten en los libros. En el Apéndice A se encuentra la ecuación del gap superconductor a temperatura igual a cero a partir de la función de onda y utilizando el formalismo de la segunda cuantización mediante los operadores de creación y aniquilación de Fermi, se define y calcula la energía de condensación y posteriormente se muestra una forma alternativa de llegar a la misma ecuación para el gap a partir de una transformación canónica. En el Apéndice B se muestra la forma de calcular la ecuación para la brecha a temperatura distinta de cero y se encuentran algunas de las relaciones universales de la teoría BCS.

## Capítulo 2

# Preliminares

### 2.1. Gas de Fermi de electrones libres

El modelo de electrones libres [24, 27] considera que los electrones más débilmente ligados a los átomos se pueden mover libremente por todo el volumen de un metal sin interactuar entre sí ni con los núcleos iónicos por lo que la energía total es puramente cinética. Debido a que los electrones no interactúan con otros, podemos encontrar las propiedades del estado base de un sistema de  $N$  electrones encontrando primero los niveles de energía de un solo electrón en el volumen  $L^3$  y después llenando estos niveles de forma consistente con el principio de exclusión de Pauli.

Un electrón se describe por una función de onda  $\psi(\mathbf{r})$  y una orientación de espín. Si el electrón es libre de influencia externa, la función de onda asociada a un nivel de energía  $\epsilon$  satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(\mathbf{r}) = \epsilon \psi(\mathbf{r}). \quad (2.1)$$

Consideremos los electrones restringidos a moverse en un cubo de arista  $L$  y representamos este confinamiento mediante condiciones periódicas a la frontera en las direcciones  $x, y, z$  con período  $L$ , es decir

$$\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z) = \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z + L). \quad (2.2)$$

La elección de la condición de frontera, siempre que se trate de problemas en los que no está explícita la relación con la superficie metálica, está a nuestra disposición y puede determinarse por conveniencia matemática. Se puede verificar mediante diferenciación que las funciones de onda que satisfacen la ecuación de Schrödinger (2.1) y las condiciones (2.2) son de la forma

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.3)$$

en la que las componentes del vector de onda  $\mathbf{k}$  toma los valores

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L}n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L}n_z, \quad (2.4)$$

donde

$$n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.5)$$

Al sustituir (2.3) en (2.1) obtenemos la expresión

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{k}^2 = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (2.6)$$

para la energía  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  del nivel con vector de onda  $\mathbf{k}$ .

En el estado fundamental de un sistema de  $N$  electrones libres, los niveles ocupados pueden representarse por puntos situados dentro de una esfera en el espacio  $\mathbf{k}$  (ver Fig. 2.1). El valor de la energía en la superficie de esta esfera es la energía de Fermi,  $E_F$ , que se define como la energía del máximo nivel ocupado y los vectores de onda en la superficie de Fermi tienen un módulo  $k_F$  tal que

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}k_F^2. \quad (2.7)$$

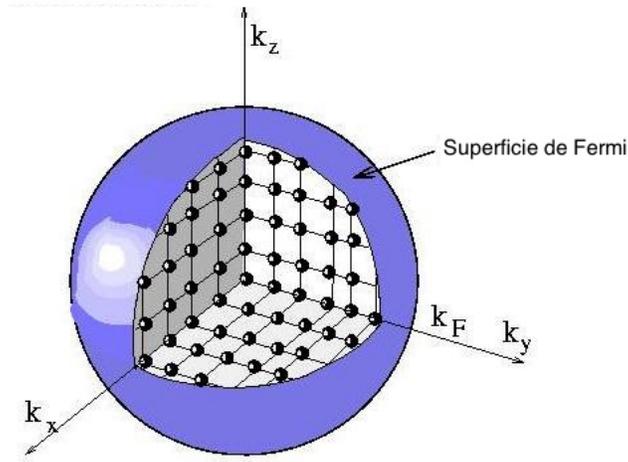


Figura 2.1: En el estado fundamental de un sistema de  $N$  electrones libres, los niveles ocupados llenan completamente una esfera de radio  $k_F$ . (Imagen modificada de [28]).

De las condiciones (2.4) vemos que hay vectores de onda permitidos caracterizados por tres números cuánticos distintos  $k_x$ ,  $k_y$ ,  $k_z$ , por cada elemento de volumen  $(2\pi/L)^3$  del espacio  $\mathbf{k}$ . Por lo tanto, en la esfera de volumen  $4\pi k_F^3/3$ , el número total de orbitales es

$$2 \cdot \frac{4\pi k_F^3/3}{(2\pi/L)^3} = \frac{L^3}{3\pi^2} k_F^3 = N, \quad (2.8)$$

donde el factor 2 de la izquierda proviene de los dos valores permitidos de espín para cada valor permitido de  $\mathbf{k}$ .

El vector de onda de Fermi

$$k_F = \left( \frac{3\pi^2 N}{L^3} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.9)$$

depende solo de la concentración de partículas y no de sus masas.

Sustituyendo en (2.7), obtenemos

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3\pi^2 N}{L^3} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (2.10)$$

ecuación que relaciona la energía de Fermi con la densidad de electrones  $N/L^3$  y su masa  $m$ .

## 2.2. El modelo de Kronig-Penney

El modelo formulado por los físicos Ralph Kronig y William George Penney en 1931 [29] da cuenta de los estados energéticos de un electrón de conducción en un sólido cristalino. Para esto proponen un potencial periódico como el de la figura 2.2 que describe el arreglo periódico de los iones de la red cristalina. El potencial consiste en una serie de barreras de altura  $U_0$  y ancho  $b$ , separadas entre sí por una distancia  $a$ .

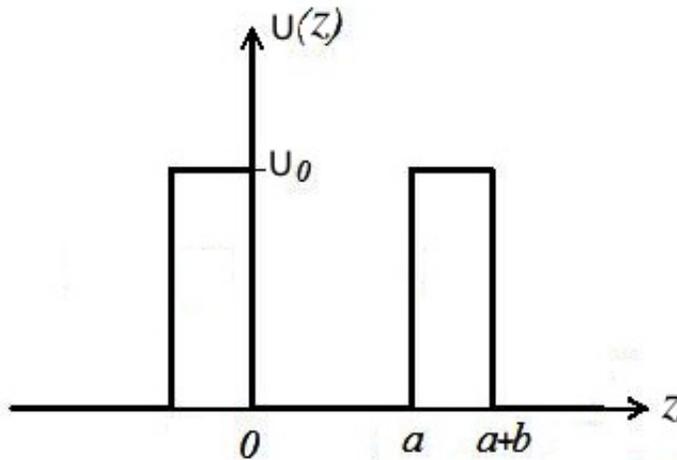


Figura 2.2: Potencial unidimensional de Kronig-Penney.

La ecuación de Schrödinger correspondiente a la región en la que  $0 < z < a$  es de la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} = \epsilon\psi \quad (2.11)$$

y en la región  $-b < z < 0$  la ecuación que se satisface es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} + U_0\psi = \epsilon\psi, \quad (2.12)$$

donde  $\epsilon$  es el valor propio de la energía.

De acuerdo al teorema de Bloch [30], las soluciones de la ecuación del Schrödinger para un potencial periódico deben ser de la forma

$$\psi_k(z) = u_k(z)e^{ikz}, \quad (2.13)$$

donde  $u_k$  tiene el periodo de la red cristalina ( $a + b$ ).

Al sustituir (2.13) en (2.11) se obtiene, para la región  $0 < z < a$ , la ecuación

$$u'' + 2iku' + (\alpha^2 - k^2)u = 0 \quad (2.14)$$

y al sustituir (2.13) en (2.12) se obtiene, para la región  $-b < z < 0$ , la ecuación

$$u'' + 2iku' - (\beta^2 + k^2)u = 0, \quad (2.15)$$

donde  $u'$  y  $u''$  representan la primera y segunda derivada de  $u$  respecto a  $z$  respectivamente y se ha eliminado la dependencia de  $u$  en  $k$  para simplificar la notación.

Las solución para (2.14) es

$$u = Ae^{i(\alpha-k)z} + Be^{-i(\alpha+k)z} \quad 0 < z < a \quad (2.16)$$

y para (2.15)

$$u = Ce^{(\beta-ik)z} + De^{-i(\beta+ik)z} \quad a < z < a + b, \quad (2.17)$$

donde se han definido

$$\alpha^2 = \frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \quad (2.18)$$

y

$$\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - \epsilon). \quad (2.19)$$

Las constantes  $A$ ,  $B$ ,  $C$  y  $D$  se determinan de tal forma que  $u$  y  $du/dz$  sean continuas en  $z = 0$  y  $z = a$  y por la periodicidad requerida para  $u(z)$ , es decir  $u(a) = u(-b)$  y  $u'(a) = u'(-b)$  entonces

$$A + B = C + D;$$

$$i(\alpha - k)A - i(\alpha + k)B = (\beta - ik)C - (\beta + ik)D; \quad (2.20)$$

$$Ae^{i(\alpha-k)a} + Be^{-i(\alpha+k)a} = Ce^{-(\beta-ik)b} + De^{(\beta+ik)b};$$

$$i(\alpha - k)Ae^{i(\alpha-k)a} - i(\alpha + k)Be^{-i(\alpha+k)a} = (\beta - ik)Ce^{-(\beta-ik)b} - (\beta + ik)De^{(\beta+ik)b};$$

El sistema (2.20) tiene solución distinta a la trivial si el determinante asociado se anula, esto pasa si

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sinh(\beta b) \sin(\alpha a) + \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) = \cos[k(a + b)]. \quad (2.21)$$

La ecuación (2.21) se simplifica en el límite de barreras tipo delta de Dirac, es decir cuando  $U_0 \rightarrow \infty$  y  $b \rightarrow 0$  tal que  $U_0 b = cte$ . En este límite,  $\beta^2 \approx 2mU_0/\hbar^2$  ya que  $U_0 \gg \epsilon$ , por lo cual  $\beta \sim \sqrt{U_0}$  entonces,  $\beta b \rightarrow 0$  y así  $\cosh(\beta b) \rightarrow 1$  de tal forma que el segundo miembro de (2.21) se simplifica a  $\cos(\alpha a)$ . Por otro lado, se tiene también que  $[(\beta^2 - \alpha^2)/2\alpha\beta] \sinh(\beta b) \approx (\beta^2/2\alpha\beta) \sinh(\beta b)$  nuevamente debido a que  $U_0 \gg \epsilon$ , por lo que  $(\beta^2 b/2\alpha\beta b) \sinh(\beta b) \rightarrow \beta^2 b/2\alpha$  ya que  $[\sinh(\beta b)/\beta b] \rightarrow 1$  cuando  $\beta b \rightarrow 0$ . Por lo tanto la ecuación (2.21) se reduce a

$$\frac{P}{\alpha a} \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos(ka), \quad (2.22)$$

donde  $P = \beta^2 ba/2$  es conocido como el parámetro de impermeabilidad de las capas y está asociado con la intensidad del potencial de las barreras.

De acuerdo a (2.18),  $\alpha$  es una función de la energía, esto quiere decir que la energía del electrón en la dirección  $z$  está restringida a ciertos valores, los cuales dependen del valor de  $P$ . El  $\cos(ka)$  siempre toma valores entre -1 y 1, entonces los únicos valores aceptados para  $\alpha$  son aquellos en la región comprendida donde la gráfica de  $(P/\alpha a) \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a)$  se interseca con las líneas horizontales. Esto se observa en la figura 2.3 para  $P = 3\pi/2$ . Los valores de la energía que quedan fuera de la región entre  $\pm 1$  forman bandas prohibidas en el espectro de energía.

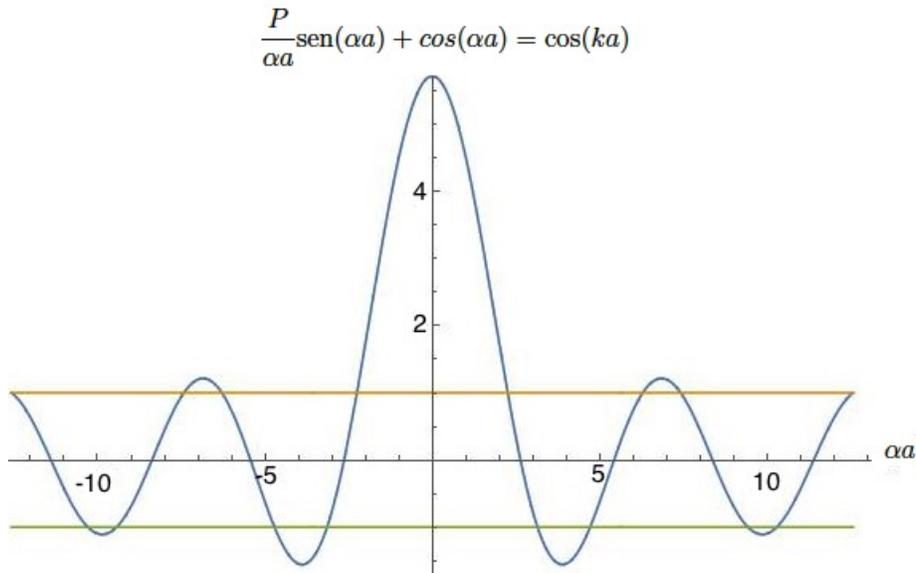


Figura 2.3: Gráfica de  $(P/\alpha a) \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a)$  para  $P = 3\pi/2$ . Los valores permitidos de la energía  $\epsilon$  están dados por aquellos intervalos de  $\alpha$  para los cuales la función se encuentra entre 1 y -1.

El modelo de Kronig-Penney predice que las discontinuidades en el espectro de energías ocurren cuando  $k = n\pi/a$  con  $n = 1, 2, 3, \dots$

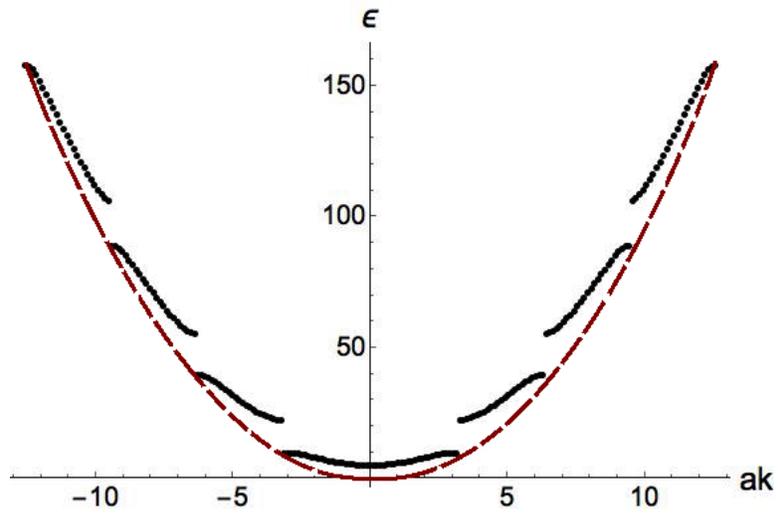


Figura 2.4: Energía en función del número de onda para el potencial de Kronig-Penney en la región extendida con  $P = 3\pi/2$ . La línea roja punteada representa el caso del gas libre.

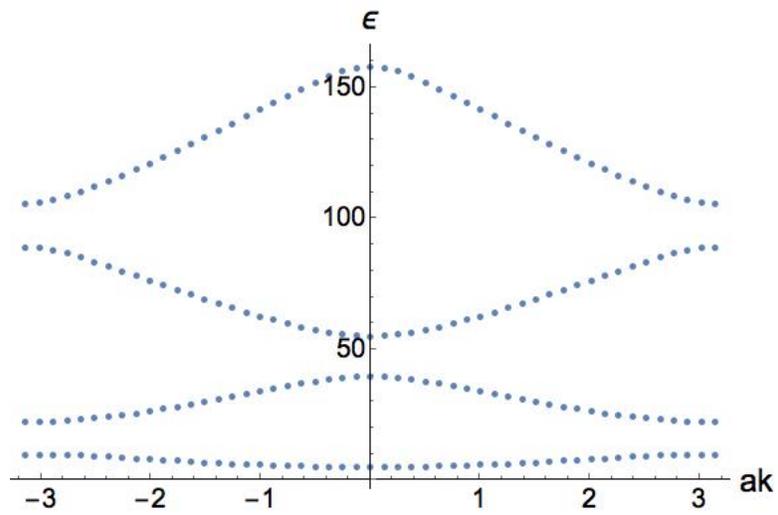


Figura 2.5: Se presentan las primeras cuatro bandas del espectro de energía en función del número de onda para el potencial de Kronig-Penney en la región entre  $-\pi$  y  $\pi$  con  $P = 3\pi/2$ .

### 2.3. El problema de Cooper

Cooper demostró que cuando se tienen dos electrones que interactúan atractivamente, aunque fuera mediante un potencial arbitrariamente débil, sobre el mar de Fermi, se produce un estado ligado llamado par de Cooper que disminuye la energía del sistema, es decir, los dos electrones apareados tienen menor energía que si estuvieran no apareados.

La interacción entre los electrones en un sólido no es sencilla y describir un modelo completo puede ser un problema muy complicado por lo que, en el planteamiento de Cooper, únicamente se considera la interacción coulombiana y la interacción mediada por fonones. Se supone que el electrón, al desplazarse a través de la red, atrae a los iones produciendo un aumento en la densidad de carga positiva que a su vez atrae a otro electrón, hablamos entonces de una atracción mediada por fonones (ver figura 2.6). Por debajo de una temperatura crítica  $T_c$  este mecanismo produce los pares de Cooper y por tanto, la superconductividad.

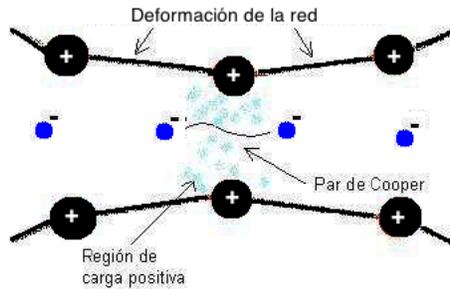


Figura 2.6: Formación de pares de Cooper mediante la interacción de los electrones con los iones de la red.

A continuación se discute el cálculo de Cooper de manera similar a [31].

En la representación del sistema de coordenadas, la ecuación de Schrödinger para dos cuerpos es de la forma:

$$H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{E}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.23)$$

donde  $H$  corresponde al hamiltoniano de dos partículas que interactúan y poseen igual masa  $m$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 + \hat{V}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (2.24)$$

Haciendo el cambio de variables  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ ,  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  la ecuación (2.23) se vuelve

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{4m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \hat{V}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \mathcal{E} \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (2.25)$$

donde  $r \equiv |\mathbf{r}|$ . Haciendo la expansión

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{k_1, k_2} \psi_{k_1, k_2} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \quad (2.26)$$

y usando las coordenadas de centro de masa  $\mathbf{K} \equiv \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$  y momento relativo  $\mathbf{k} \equiv (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/2$  la función de onda tiene la siguiente expansión

$$\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{k}} \psi_{k, K} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.27)$$

Sustituyendo (2.27) en (2.25) se obtiene

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{K}} \psi_{k, K} \left[ -\frac{\hbar^2 K^2}{4m} + \frac{\hbar^2 k^2}{m} - \mathcal{E} \right] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} = -\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{K}} \psi_{k, K} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}} \quad (2.28)$$

Multiplicando la ecuación (2.28) por  $e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{K}' \cdot \mathbf{R}}$  y después integrando sobre las variables  $\mathbf{r}, \mathbf{R}$ , de tal forma que se pueda usar la identidad

$$\frac{1}{L^d} \int d^d x e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{x}} \xrightarrow{L^d \rightarrow \infty} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}, \quad (2.29)$$

donde  $L^d$  es el volumen del sistema  $d$ -dimensional, se tiene

$$\left[ \frac{\hbar^2 K^2}{4m} + \frac{\hbar^2 k^2}{m} - \mathcal{E} \right] \psi_{k, K} = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(\mathbf{K}) \psi_{k', K}. \quad (2.30)$$

En (2.30)

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(\mathbf{K}) \equiv (1/L^d) \int d^d r e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}} \hat{V}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (2.31)$$

cuya dependencia en  $\mathbf{K}$  es consecuencia de la conservación del momento total  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2$ .

Para el caso de la interacción del modelo Cooper

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{K}) = \begin{cases} -V & \text{si } E_F < \varepsilon_{k_1}, \varepsilon_{k_2}, \varepsilon_{k'_1}, \varepsilon_{k'_2} < E_F + \hbar\omega_D \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (2.32)$$

con  $V > 0$ ,  $\hbar\omega_D$  la energía de Debye correspondiente a la energía máxima de los fonones asociados con las vibraciones máximas de la red donde se encuentra el gas de electrones y  $E_F$  la energía de Fermi; la ecuación (2.30) se puede escribir como

$$\psi_{k,K} = \frac{V}{\left[\frac{\hbar^2 K^2}{4m} + \frac{\hbar^2 k^2}{m} - \mathcal{E}\right]} \sum'_{\mathbf{k}'} \psi_{k',K'}, \quad (2.33)$$

la suma primada significa que para cada valor de  $\mathbf{K}$ , la suma sobre  $\mathbf{k}$  debe realizarse únicamente sobre la región que satisface (2.32), (ver figura 2.7), entonces

$$\sum_{\mathbf{k}}' \psi_{k,K} = \sum_{\mathbf{k}}' \frac{V}{\left[\frac{\hbar^2 K^2}{4m} + \frac{\hbar^2 k^2}{m} - \mathcal{E}\right]} \sum'_{\mathbf{k}'} \psi_{k',K'}, \quad (2.34)$$

por lo que

$$\sum_{\mathbf{k}}' \frac{1}{\hbar^2 k^2/m + \hbar^2 K^2/4m - 2E_F - \mathcal{E}_K} = \frac{1}{V}, \quad (2.35)$$

donde se ha puesto explícitamente que el eigenvalor  $\mathcal{E}(\mathbf{K}) \equiv 2E_F + \mathcal{E}_k$  depende sólo del momento del centro de masa, pues el modelo de interacción (2.32) conserva el momento total, es decir  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2$ . De la ecuación (2.35) se puede calcular el eigenvalor  $\mathcal{E}_K$  para cada valor de  $K$ .

Para el caso  $K = 0$  la ecuación (2.35) se reduce a

$$\sum_{\mathbf{k}}' \frac{1}{\hbar^2 k^2/m - 2E_F - \mathcal{E}_0} = \frac{1}{V}. \quad (2.36)$$

Otra forma de abordar el problema es probando si en el sistema de coordenadas de centro de masa  $\mathbf{R}$  y de masa relativa  $\mathbf{r}$  la ecuación de Schrödinger es separable, lo cual resulta cierto en este caso ya que  $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  es solo función de  $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ .

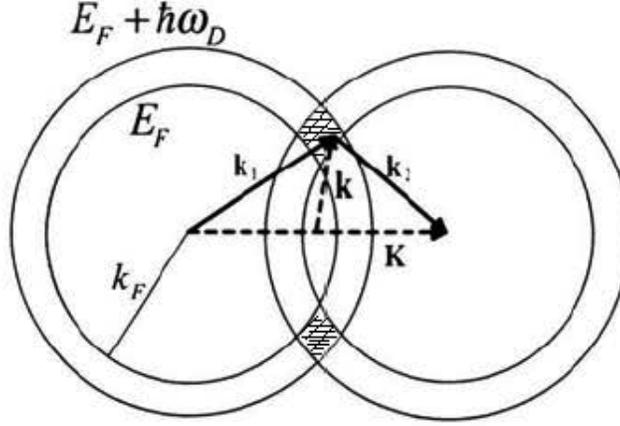


Figura 2.7: Sección transversal de volumen traslapado en el espacio  $\mathbf{k}$  donde se señalan el momento del centro de masas ( $\mathbf{K}$ ) y la zona sombreada de los pares de Cooper (donde se conserva  $\mathbf{K}$ ).

Escribiendo  $\psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \Phi(\mathbf{R})\phi(\mathbf{r})$  resultan el siguiente par de ecuaciones

$$-\frac{\hbar^2}{4m}\nabla_{\mathbf{R}}^2\Phi(\mathbf{R}) = E_R\Phi(\mathbf{R}), \quad (2.37)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m}\nabla_r^2 + \hat{V}(\mathbf{r})\right]\phi(\mathbf{r}) = E_r\phi(\mathbf{r}), \quad (2.38)$$

donde la energía total es  $\mathcal{E} = E_R + E_r$ .

En la representación de momentos la ecuación de Schrödinger para la función de onda relativa  $\phi(\mathbf{r})$  puede escribirse como

$$\frac{\hbar^2 k^2}{m}\varphi_{\mathbf{k},\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{K})\varphi_{\mathbf{k}',\mathbf{K}} = E_r\varphi_{\mathbf{k},\mathbf{K}}, \quad (2.39)$$

donde se ha hecho la expansión  $\phi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k},\mathbf{K}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  y se ha usado la identidad (2.29).

La dependencia en  $\mathbf{K}$  de  $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\mathbf{K})$  y  $\varphi_{\mathbf{k},\mathbf{K}}$  se debe nuevamente a la conservación del momento total  $\mathbf{K}$ .

La solución de (2.37) es inmediata ya que corresponde a la función de onda de partícula libre

$$\Phi(\mathbf{R}) = cte. e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}, \quad (2.40)$$

por lo que la función de onda total tiene la forma

$$\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = cte. e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}, \mathbf{K}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.41)$$

La ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos para la función de onda relativa de dos cuerpos en el mar de Fermi está dada por (2.39) con la condición adicional  $\varphi_{\mathbf{k}} = 0$  para toda  $\mathbf{k}$  tal que  $|\mathbf{k}| < k_F$  (principio de exclusión de Pauli).

Usando nuevamente (2.32) para el caso  $K = 0$  tenemos que (2.39) se escribe como

$$\varphi_{\mathbf{k}, \mathbf{K}} = \frac{V}{\hbar^2 k^2 / m - E_r} \sum'_{\mathbf{k}'} \varphi_{\mathbf{k}', \mathbf{K}}, \quad (2.42)$$

el eigenvalor  $E_r$  corresponde a la eigenfunción de onda relativa en la ecuación de Schrödinger (2.42) y la suma primada significa sumar sobre toda  $\mathbf{k}$  tal que se satisfaga (2.32). Haciendo esto en ambos lados de la ecuación (2.42) se tiene la ecuación de eigenvalores  $E_r$

$$1 = V \sum'_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hbar^2 k^2 / m - E_r}. \quad (2.43)$$

Usando

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow (L/2\pi)^3 \int d^3k = \int d\epsilon N(\epsilon), \quad (2.44)$$

donde  $N(\epsilon)$  es la densidad de estados, tenemos

$$\frac{1}{V} = \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{N(\epsilon)}{2\epsilon - E_r} d\epsilon. \quad (2.45)$$

Cooper utiliza la aproximación

$$N(\epsilon) \approx N(E_F), \quad (2.46)$$

$N(E_F)$  es la densidad de estados electrónicos evaluada en el nivel de Fermi, con lo cual (2.45) se escribe como

$$\frac{1}{VN(E_F)} = \frac{1}{\lambda} = \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{2\epsilon - E_r}, \quad (2.47)$$

donde se ha definido  $\lambda \equiv VN(E_F)$ . La integral es inmediata por lo que (2.47) se escribe como

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2} \ln \frac{2E_F + 2\hbar\omega_D - E_r}{2E_F - E_r}. \quad (2.48)$$

El eigenvalor  $E_r$  puede ser calculado de (2.48), dando por resultado

$$E_r = 2E_F - \frac{2\hbar\omega_D}{e^{2/\lambda} - 1} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 2E_F - 2\hbar\omega_D e^{-2/\lambda}. \quad (2.49)$$

Como la energía total  $\mathcal{E}(\mathbf{K} = 0) = 2E_F + \mathcal{E}_0 = E_r$ , se tiene que la energía de ligadura es

$$\mathcal{E}_0 = -\frac{2\hbar\omega_D}{e^{2/\lambda} - 1}. \quad (2.50)$$

El resultado anterior nos dice que existe un estado ligado con menos energía que corresponde al par de Cooper con momento de centro de masa igual a cero.

### 2.3.1. Análisis de la aproximación $N(\epsilon) \approx N(E_F)$

Si en lugar de tomar la aproximación de Cooper dada por (2.46) se considera la densidad de estados para los caso en 3D, 2D y 1D respectivamente, partiendo de la ecuación (2.45) se tiene que

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{N(E_F)} \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{N(\epsilon)}{2\epsilon - E_r} d\epsilon. \quad (2.51)$$

En 3D la densidad de estados es

$$N(\epsilon) = \frac{\sqrt{2}L^3}{\hbar^3\pi^2} m^{\frac{3}{2}} \epsilon^{\frac{1}{2}}, \quad (2.52)$$

sustituyendo (2.52) en (2.51)

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{E_F^{\frac{1}{2}}} \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{\epsilon^{\frac{1}{2}}}{2\epsilon - E_r} d\epsilon \quad (2.53)$$

En 2D

$$N(\epsilon) = \frac{2\pi L^2 m}{\hbar^2}, \quad (2.54)$$

sustituyendo en (2.51)

$$\frac{1}{\lambda} = \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{1}{2\epsilon - E_r} d\epsilon = \frac{1}{2} \ln \frac{2E_F + 2\hbar\omega_D - E_r}{2E_F - E_r}. \quad (2.55)$$

Finalmente en 1D se tiene

$$\frac{1}{\lambda} = E_F^{\frac{1}{2}} \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{1}{\epsilon^{\frac{1}{2}}(2\epsilon - E_r)} d\epsilon. \quad (2.56)$$

Se observa que la ecuación (2.55) es igual a la ecuación (2.48) obtenida usando (2.46), es decir, la aproximación usada por Cooper es exacta en 2D.

Graficando  $E_r$  vs  $1/\lambda$  de las ecuaciones (2.53), (2.55) y (2.56) con una energía de Fermi  $E_F = 1$  eV y para valores de  $\hbar\omega_D = 0.001$  eV,  $0.01$  eV,  $0.1$  eV,  $0.3$  eV (ver Fig. 2.8, 2.9, 2.10 y 2.11) se encuentra que las diferencias comienzan a ser importantes para valores de la energía de Debye,  $\hbar\omega_D$ , del orden de  $0.1$  eV sin embargo la aproximación de Cooper es buena en 1D y 2D siempre que  $\hbar\omega_D$  es menor que este valor.

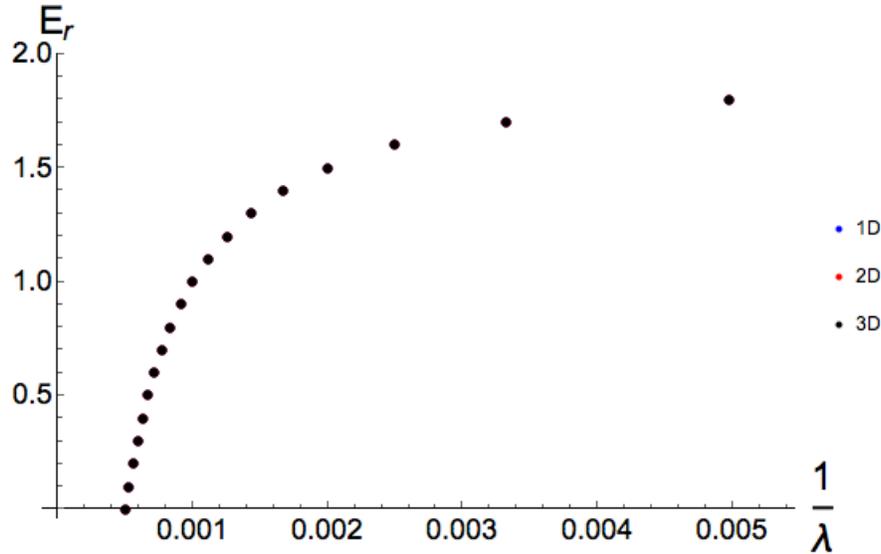


Figura 2.8:  $E_r$  vs  $1/\lambda$ , Energía de Fermi = 1 eV,  $\hbar\omega_D = 0.001$  eV.

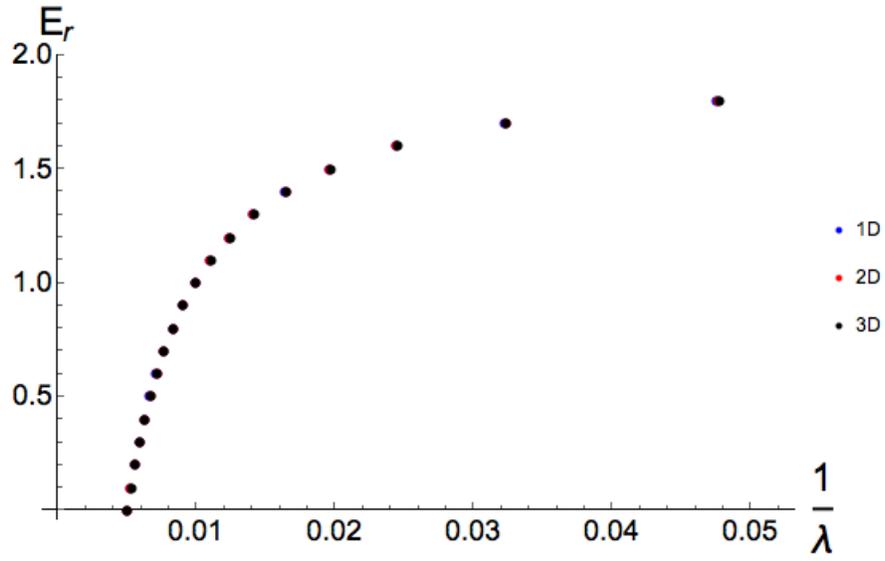


Figura 2.9:  $E_r$  vs  $1/\lambda$ , Energía de Fermi = 1 eV,  $\hbar\omega_D = 0.01$  eV.

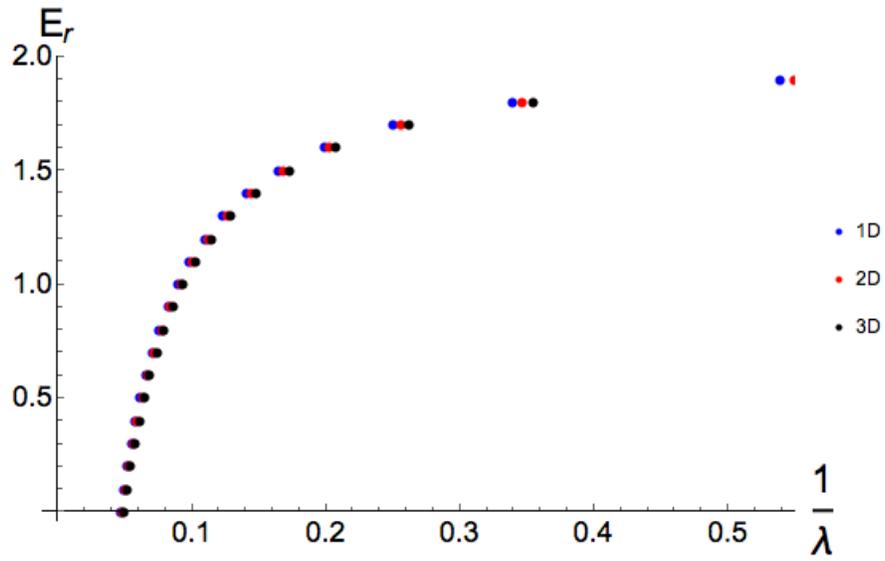


Figura 2.10:  $E_r$  vs  $1/\lambda$ , Energía de Fermi = 1 eV,  $\hbar\omega_D = 0.1$  eV.

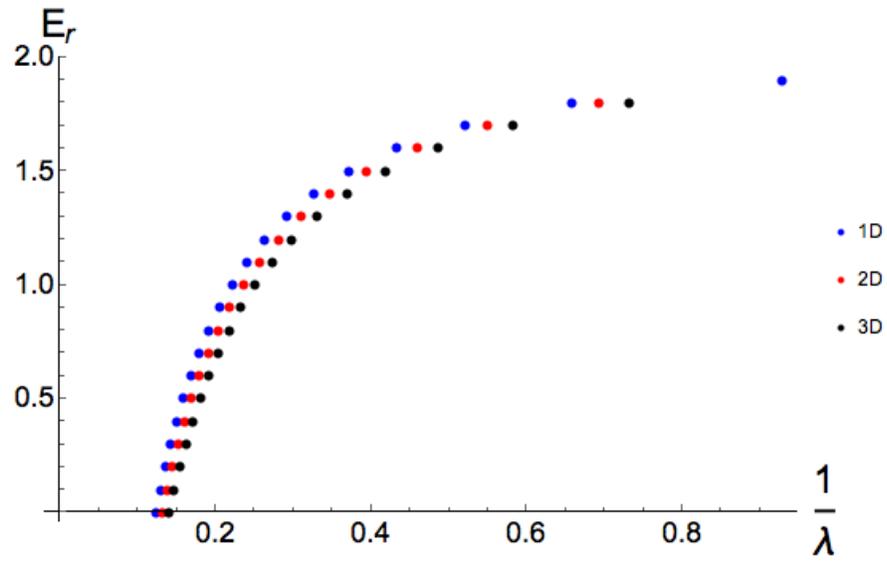


Figura 2.11:  $E_r$  vs  $1/\lambda$ , Energía de Fermi=1 eV,  $\hbar\omega_D = 0.3$  eV.

## Capítulo 3

# Efectos del potencial de Kronig-Penney

### 3.1. La superficie de Fermi para un gas de Fermi en presencia de un potencial de Kronig-Penney en una dirección

Consideremos un gas de  $N$  fermiones, que no interactúan entre sí, en un potencial periódico modelado por placas separadas una distancia " $a$ " las cuales se describen como un arreglo periódico de potenciales delta en la dirección  $z$ . Dichos fermiones son libres de moverse en las otras dos direcciones (ver figura 3.1).

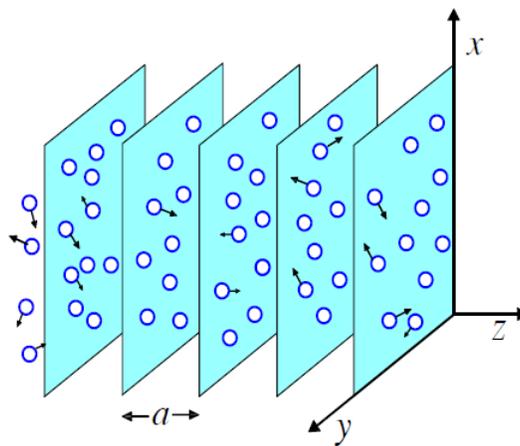


Figura 3.1: Fermiones en un potencial periódico. (Imagen tomada de [34]).

Este modelo  $z$ -direccional es una versión del potencial de Kronig-Penney en la aproximación de barreras tipo deltas de Dirac.

La ecuación de Schrödinger para cualquier fermión de masa  $m$  es separable en las direcciones  $x$ ,  $y$  y  $z$  donde la energía de una partícula como función del momento  $\mathbf{k}=(k_x, k_y, k_z)$  es  $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{k_x} + \epsilon_{k_y} + \epsilon_{k_z}$ , donde

$$\epsilon_{k_x, k_y} = \frac{\hbar^2 k_{x,y}^2}{2m} \quad (3.1)$$

con  $k_{x,y} = 2\pi n_{x,y}/L$  y  $n_{x,y} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , es decir, en las direcciones  $x$ ,  $y$  son libres y satisfacen condiciones periódicas a la frontera en una caja de largo  $L$ .

De la ecuación (2.22), asignando valores para  $ak_z$  entre  $-\pi$  y  $\pi$  en la primera zona de Brillouin o entre  $-4\pi$  y  $4\pi$  para la región extendida, mediante un algoritmo computacional programado en “Mathematica”, se pueden obtener valores para  $\alpha a$  que satisfacen dicha ecuación. Si definimos

$$\epsilon_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (3.2)$$

y redefinimos

$$e_{k_z} \equiv \frac{\epsilon_{k_z}}{\epsilon_0} = (\alpha a)^2 \quad (3.3)$$

podemos encontrar las energías en la dirección  $z$ , en este caso

$$\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{\epsilon_0} = a^2(k_x^2 + k_y^2) + e_{k_z}. \quad (3.4)$$

Dada la simetría circular en el plano  $xy$ , definimos

$$k_{\perp}^2 \equiv (k_x^2 + k_y^2) \quad (3.5)$$

entonces, para una energía de Fermi dada se tiene que

$$e_F = a^2 k_{\perp}^2 + e_{k_z} \quad (3.6)$$

donde  $e_F \equiv \frac{E_F}{\epsilon_0}$ , por lo que  $a^2 k_{\perp}^2 = e_F - e_{k_z}$  y por lo tanto

$$ak_{\perp} = \sqrt{e_F - e_{k_z}}. \quad (3.7)$$

Si ahora escribimos  $ak_x = ak_{\perp} \cos\theta$  y  $ak_y = ak_{\perp} \sin\theta$  para  $0 \leq \theta \leq 2\pi$  es posible generar valores para  $ak_x$ ,  $ak_y$  a partir de  $e_{k_z}$  tales que satisfagan la condición (3.7) con lo cual graficamos la superficie de Fermi para alguna  $e_F$  dada.

En la figura 3.2 se muestra la superficie de Fermi para el caso del gas libre ( $P = 0$ ), que corresponde a una esfera.

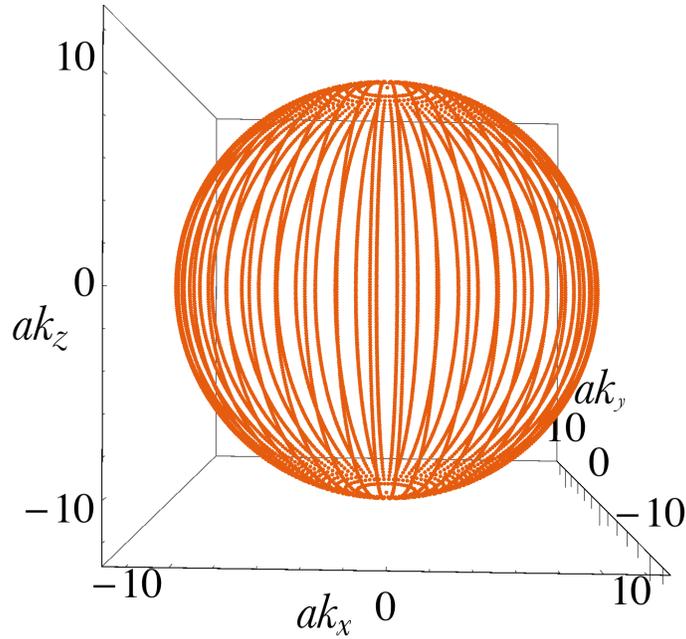


Figura 3.2: Superficie de Fermi para  $P = 0$ .

En las figuras 3.3, 3.4, 3.5 y 3.6; se muestran las superficies de Fermi para un valor de  $P = 3\pi/2$  y energía de Fermi igual al valor máximo de la energía en la primera, segunda, tercera y cuarta banda respectivamente. Como puede observarse, aparecen discontinuidades y el número de éstas depende del número de brechas que hay hasta la energía de Fermi dada.

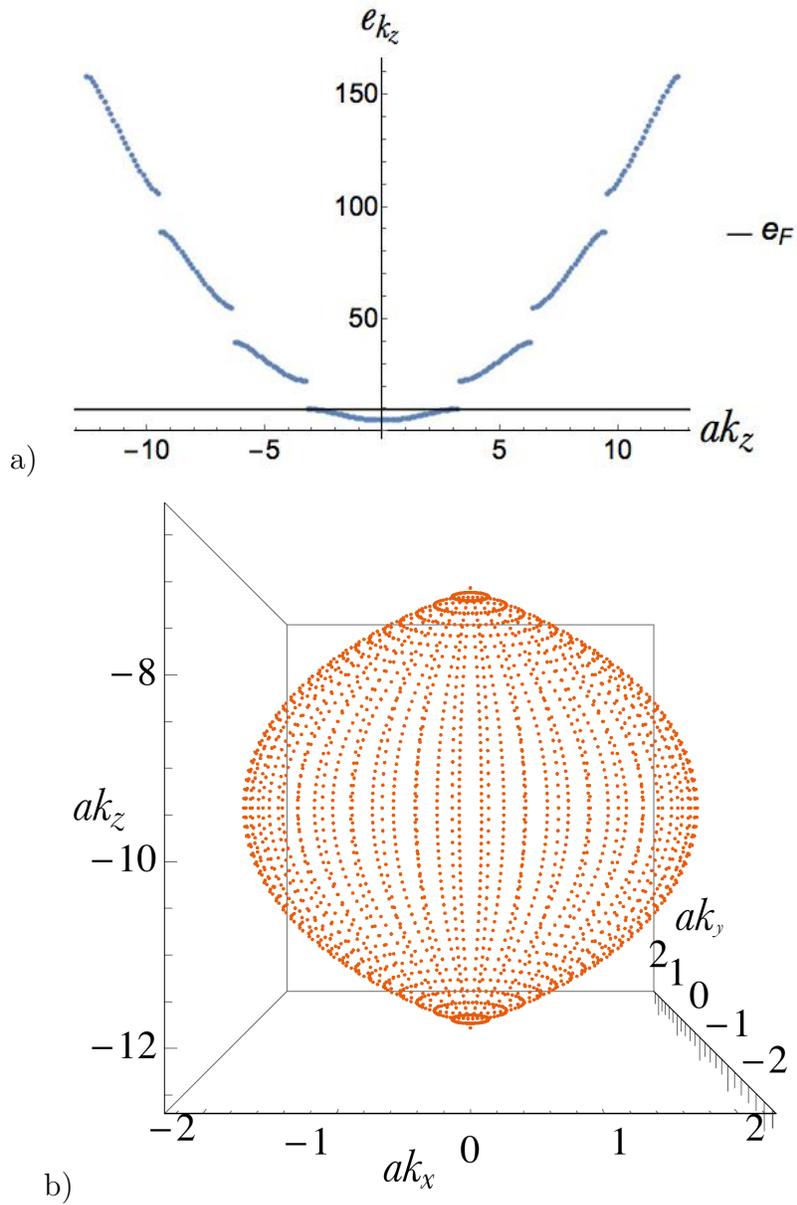


Figura 3.3:  $P = 3\pi/2$ ,  $e_F = 9.8696$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada.

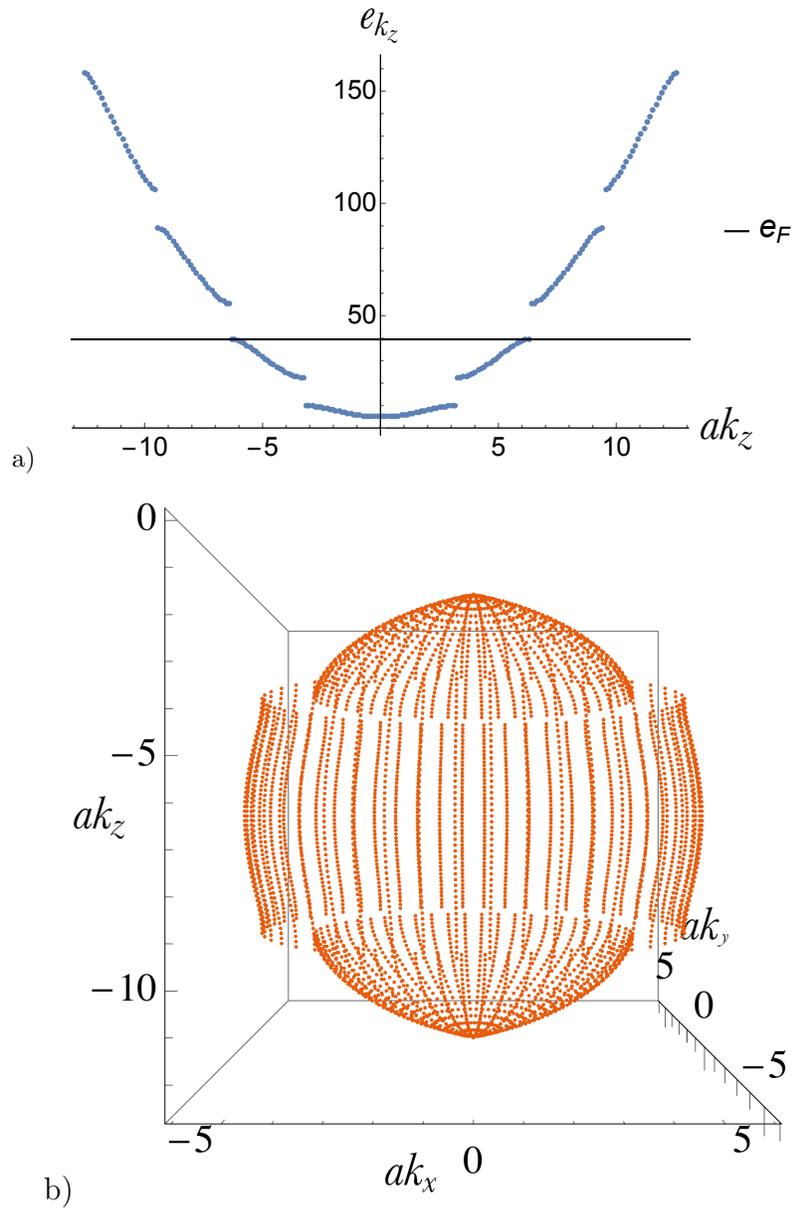


Figura 3.4:  $P = 3\pi/2$ ,  $e_F = 39.4784$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada.

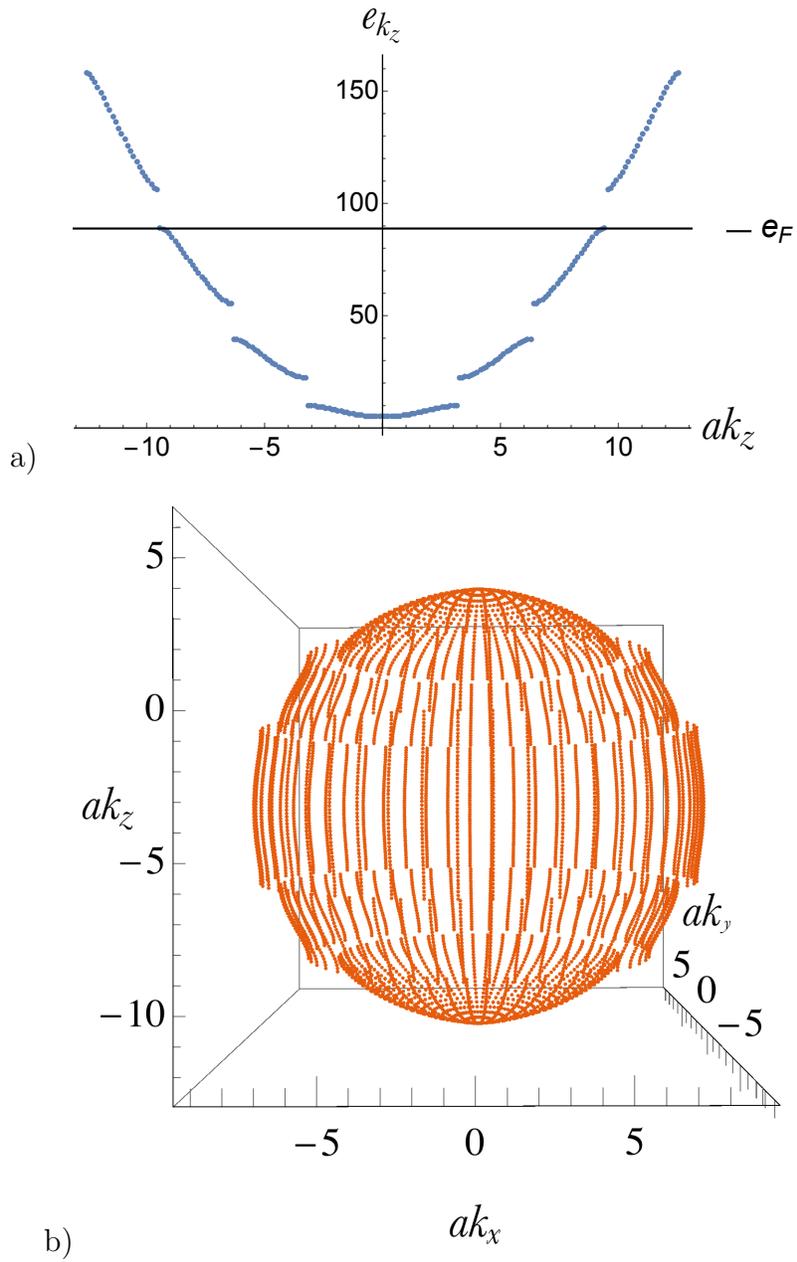


Figura 3.5:  $P = 3\pi/2$ ,  $e_F = 88.8264$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada.

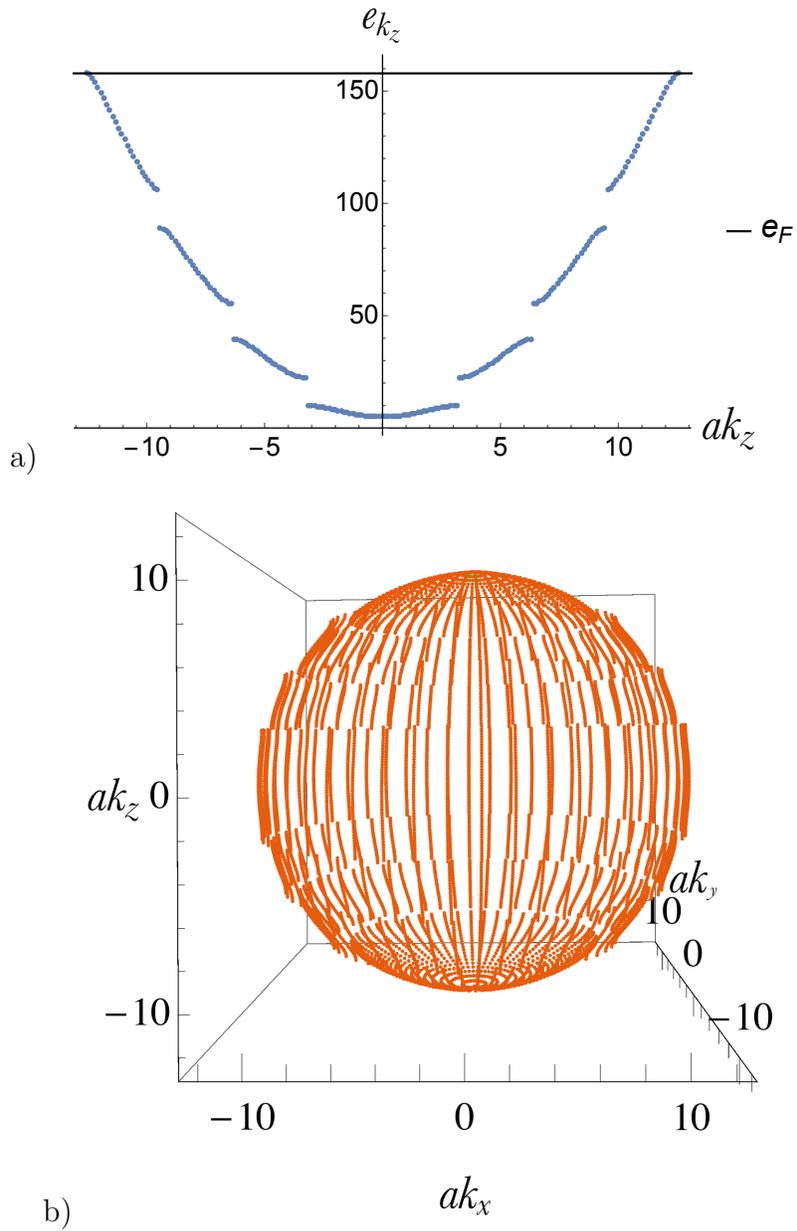


Figura 3.6:  $P = 3\pi/2$ ,  $e_F = 157.914$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada.

Cuando el valor de la energía de Fermi se encuentra en la banda prohibida se obtienen

superficies como las de las figuras 3.7, 3.8 y 3.9

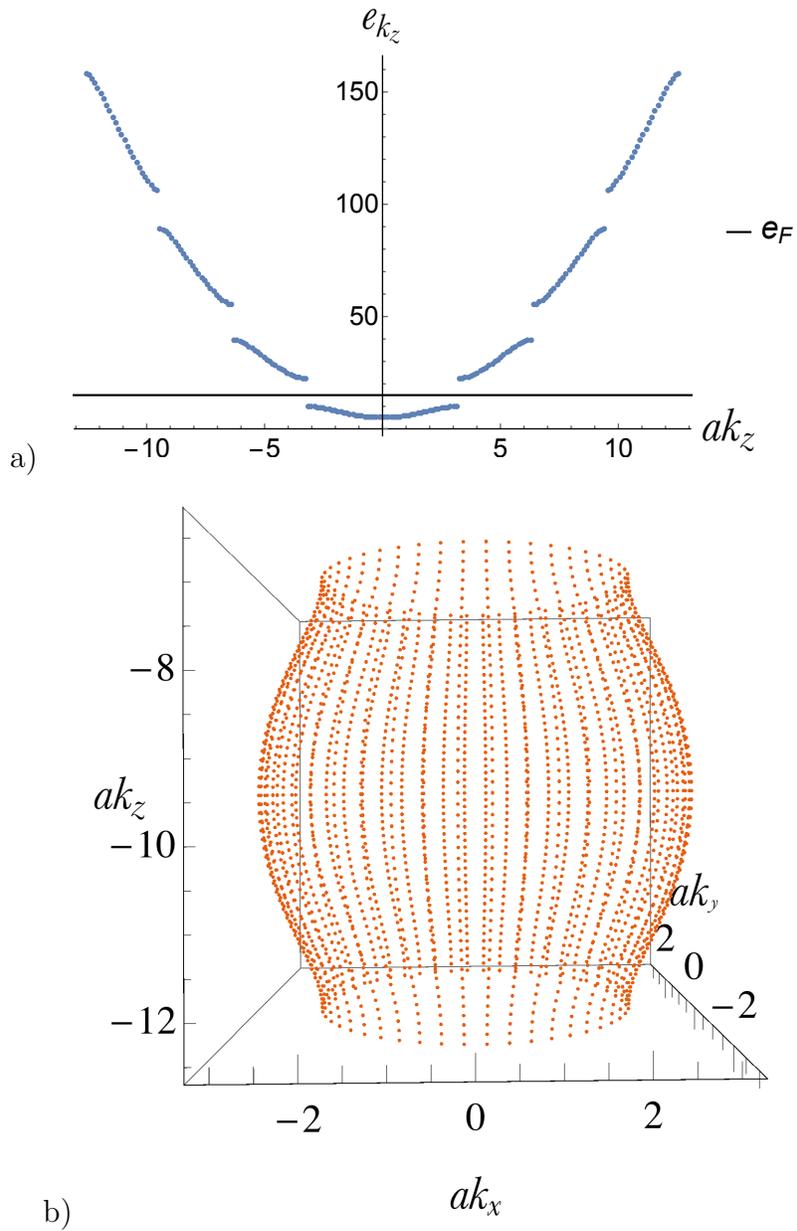


Figura 3.7:  $P = 3\pi/2$ ,  $e_F=15$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada.

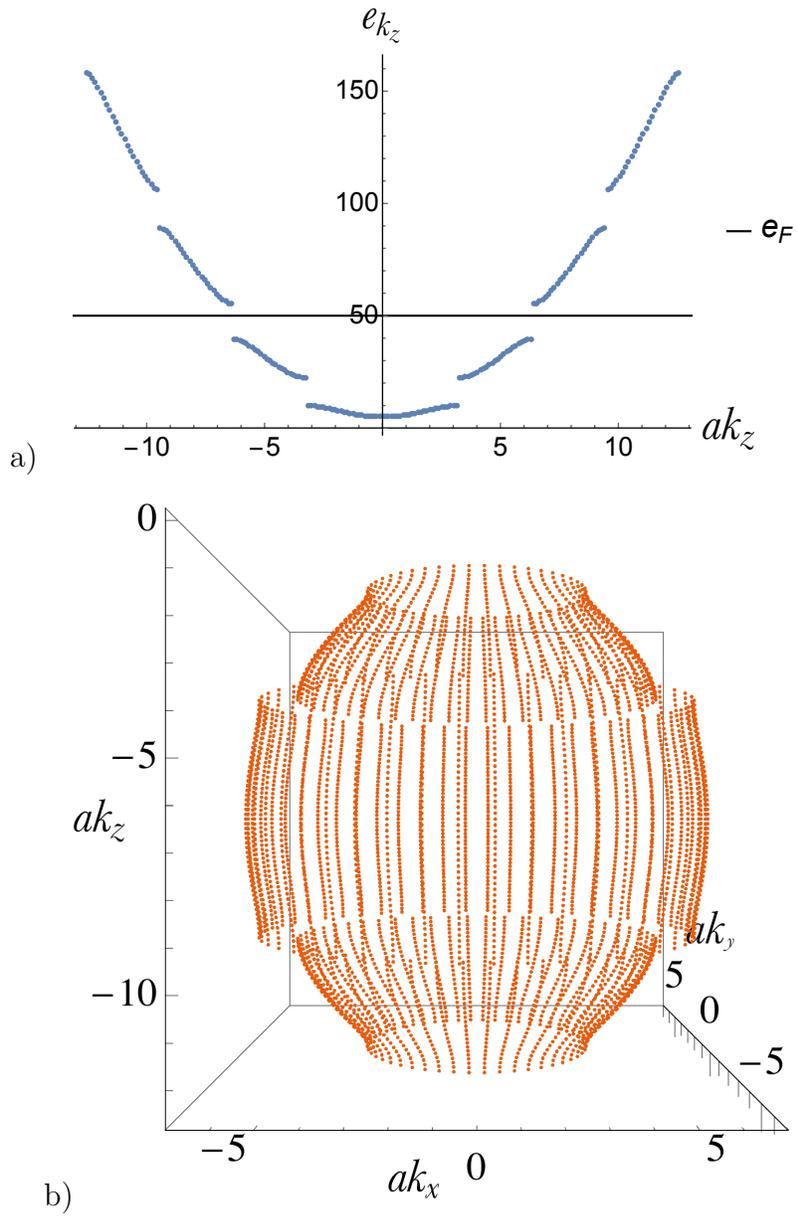


Figura 3.8:  $P = 3\pi/2$ ,  $e_F=50$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada.

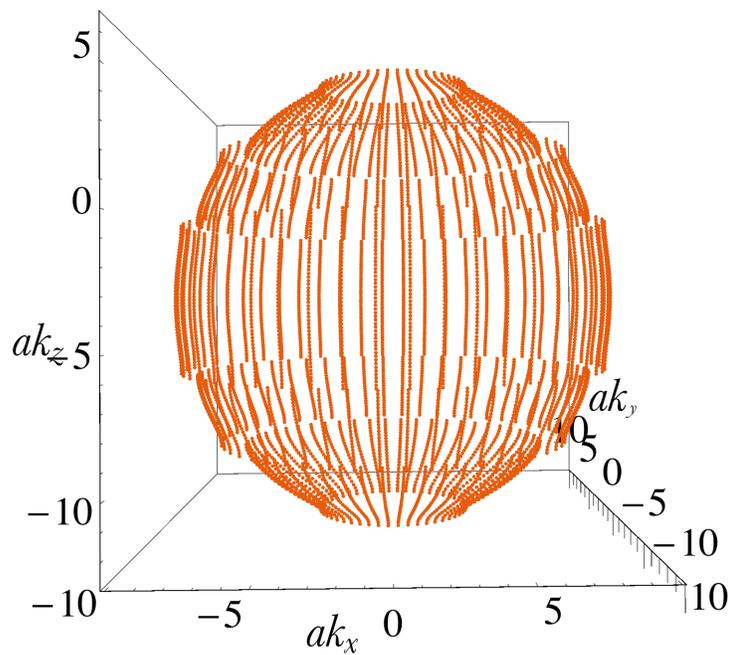
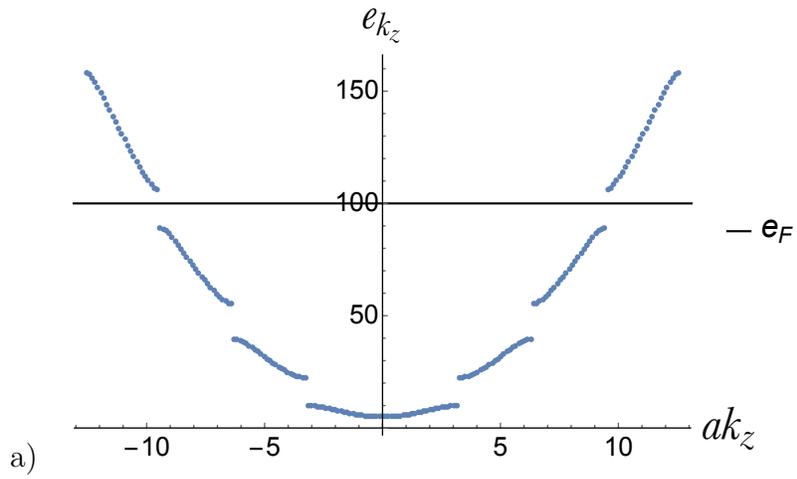


Figura 3.9:  $P = 3\pi/2$ ,  $e_F=100$ . a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas. b) Superficie de Fermi correspondiente al valor de la energía de Fermi dada.

### 3.2. Densidad de partículas para un gas de Fermi en presencia de un potencial de Kronig-Penney en una dirección

La densidad de partículas por unidad de volumen en el espacio  $\mathbf{k}$  se calculará como

$$n = \frac{N}{L^3} = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\Omega(e_F)} d^3k = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\Omega(e_F)} k_r dk_r dk_\varphi dk_z, \quad (3.8)$$

donde el factor de 2 corresponde a las dos orientaciones posibles de espín y se ha usado  $d^3k$  en coordenadas cilíndricas como  $d^3k = k_r dk_r dk_\varphi dk_z$ .

La integral de la ecuación (3.8) se realiza sobre el volumen  $\Omega(e_F)$  en el espacio  $\mathbf{k}$  determinado por las superficies correspondientes dada la energía de Fermi. Gracias a la simetría del problema, la integral sobre  $k_\varphi$  nos da como resultado un factor  $2\pi$  y la integral para  $k_r$  será  $\frac{[k_\perp(E_{k_z})]^2}{2}$  por lo que la ecuación (3.8) se reduce a

$$n = \frac{1}{(2\pi)^2} \int [k_\perp(E_{k_z})]^2 dk_z. \quad (3.9)$$

Adimensionalizando nuevamente con (3.2), de la ecuación (3.6) se tiene que  $(ak_\perp)^2 = e_F - e_{k_z}$ , multiplicando ambos lados de (3.9) por  $a^3$  se tiene

$$n' = na^3 = \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{j=1}^{\sigma} \int (e_F - e_{k_z}^j) da k_z \quad (3.10)$$

donde  $j$  denota el índice de banda y  $\sigma$  indica el máximo índice de la banda que contiene el valor de la energía de Fermi y los límites de integración se determinan a partir de la condición  $e_F - e_{k_z}^\sigma = 0$ . Esta integral se resuelve numéricamente utilizando el método de las cuadraturas de Gauss-Legendre [32, 33] como

$$\int_{\beta}^{\gamma} f(x) dx = \frac{\gamma - \beta}{2} \sum_{i=1}^n w_i f\left(\frac{\gamma - \beta}{2} x_i + \frac{\beta + \gamma}{2}\right) \quad (3.11)$$

donde  $x_i$  con  $i = 1, \dots, n$  son justamente los  $n$  ceros del polinomio de Legendre de grado  $n$  y  $w_i$  son los pesos asociados al método de integración y se calculan a partir de la fórmula  $w_i = \frac{2}{(1-x_i^2)[P'_n(x_i)]^2}$ .

Entonces la ecuación (3.10) queda de la forma

$$n' = \frac{\gamma - \beta}{2^3 \pi^2} \sum_{j=1}^{\sigma} \sum_{i=1}^n w_i (e_F - e_{k_z,i}^j), \quad (3.12)$$

donde los valores de  $e_{k_z,i}$  se encuentran resolviendo numéricamente la ecuación

$$\frac{P}{\alpha a} \text{sen}(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos\left(\frac{\gamma - \beta}{2} x_i + \frac{\beta + \gamma}{2}\right) \quad (3.13)$$

en la zona reducida de Brillouin.

El programa computacional que resuelve la ecuación (3.10) en resumen realiza los siguientes pasos:

*Calcula las primeras 20 raíces del polinomio de Lagrange → resuelve la ecuación  $\frac{P}{\alpha a} \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos(\frac{\gamma - \beta}{2} x_i + \frac{\beta + \gamma}{2})$  para  $\alpha a$  en las primeras 4 bandas en la zona reducida de Brillouin → encuentra los valores de  $e_{k_z}$  a partir de (151) y evalúa  $e_F - e_{k_z}$  para diferentes valores de  $e_F$  → calcula los pesos  $w_i$  a partir de la fórmula  $w_i = \frac{2}{(1-x_i^2)[P'_n(x_i)]^2}$  → realiza las operaciones de la ecuación (3.12) lo cual nos da un resultado muy bien aproximado de la ecuación (3.10) → finalmente gráfica  $n'$  vs  $e_F$ .*

Para un gas de electrones libres es fácil ver de la ecuación (2.10) que  $n = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \epsilon_F\right)^{\frac{3}{2}}$  y que al adimensionalizar con  $\epsilon_0$  esta ecuación se escribe como

$$n' = \frac{1}{3\pi^2} e_F^{3/2} \quad (3.14)$$

La figura (3.10) muestra la gráfica del espectro de bandas en la dirección  $z$  y la gráfica de la densidad de partículas como función de la energía de Fermi para  $P = 0$  (gas libre). En este caso se observa que no existen regiones prohibidas en la gráfica de energías y la gráfica dada por la expresión analítica para el gas libre se traslapa con la obtenida numéricamente, como debe suceder (ver figura 3.11).

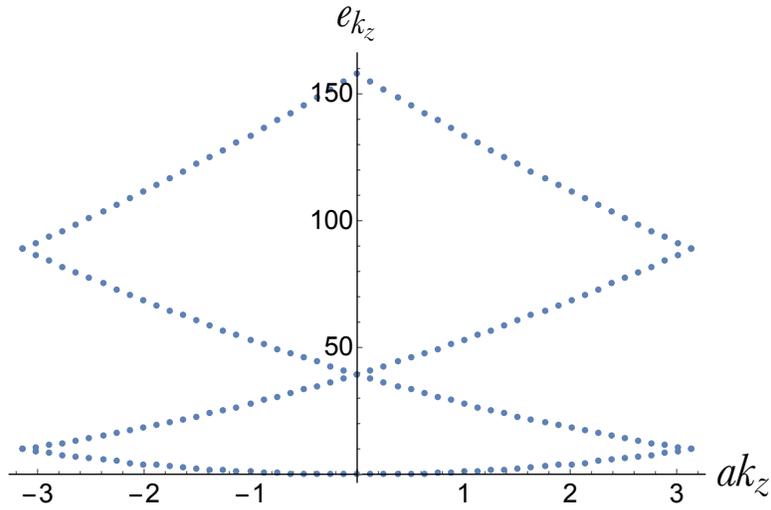


Figura 3.10: Gráfica del espectro de energía en la dirección  $z$ ,  $P = 0$ . No se presentan regiones prohibidas.

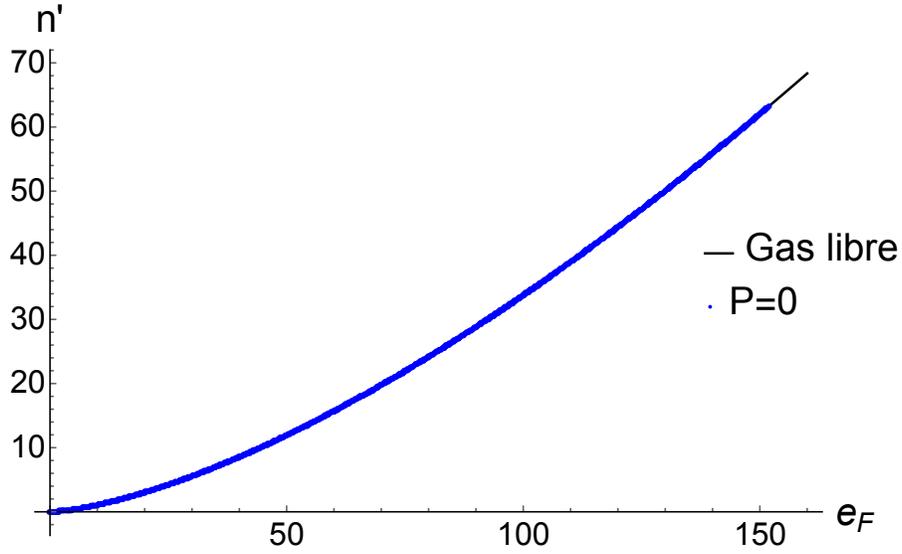


Figura 3.11: Densidad de partículas como función de la energía de Fermi para  $P = 0$ . La gráfica obtenida numéricamente se traslapa con la que se obtiene por la expresión analítica  $n' = \frac{1}{3\pi^2} e_F^{3/2}$ .

De la ecuación (3.10) se deduce que las curvas de  $n'$  vs  $e_F$  que se obtendrán para  $P \neq 0$  son lineales en la región en donde la energía de Fermi está en una banda prohibida ya que aquí no hay valores para  $e_{k_z}$  y por tanto la solución de la integral es una función lineal y se curvan cuando la energía de Fermi toma valores dentro de las regiones permitidas; esto se muestra en la figura 3.12. También se observa que la densidad de partículas, para un valor fijo de la energía de Fermi, disminuye a medida que  $P$  aumenta, esto debido a que el volumen en el espacio  $\mathbf{k}$  contenido en la superficie de Fermi también disminuye con  $P$ .

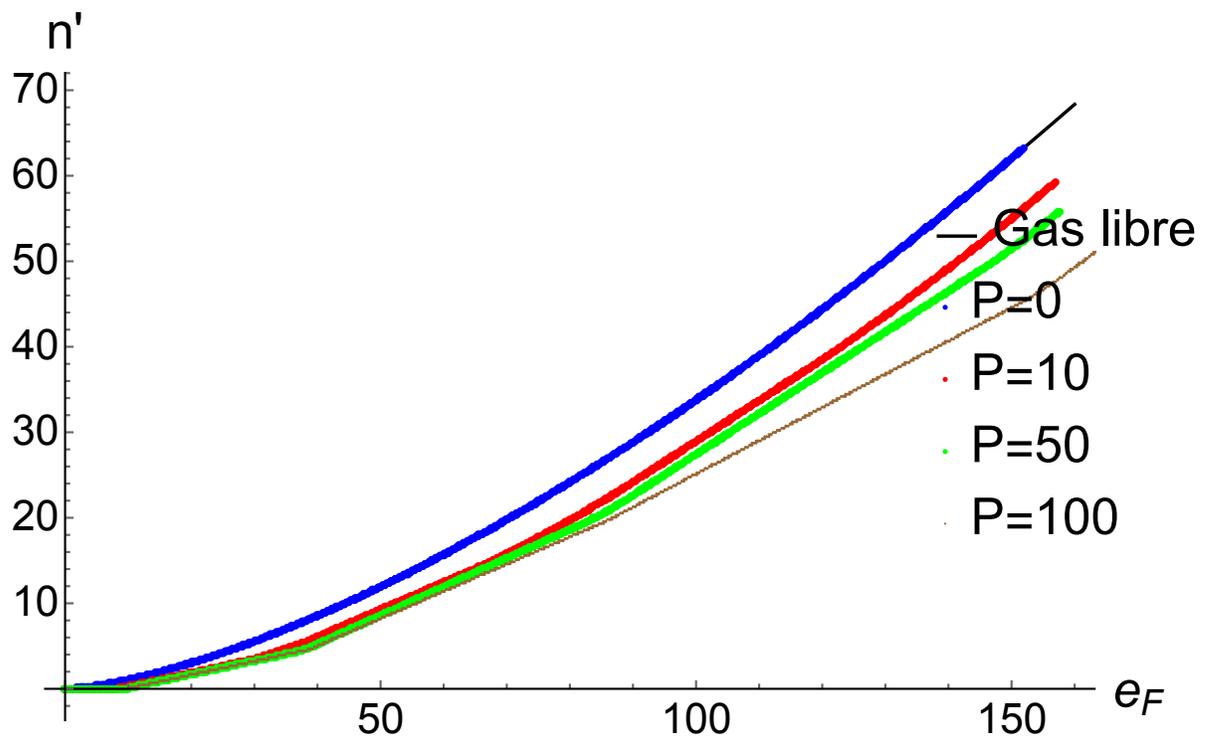


Figura 3.12: Gráficas de  $n'$  vs  $e_F$  para  $P = 0$ ,  $P = 10$ ,  $P = 50$  y  $P = 100$ .

Para corroborar con mayor detalle visual la afirmación del párrafo anterior, graficamos  $n'$  vs  $e_F$  para  $P = 10$ , con energías de Fermi entre la primer y la segunda banda del espectro de energías. Ver figuras 3.13 y 3.14

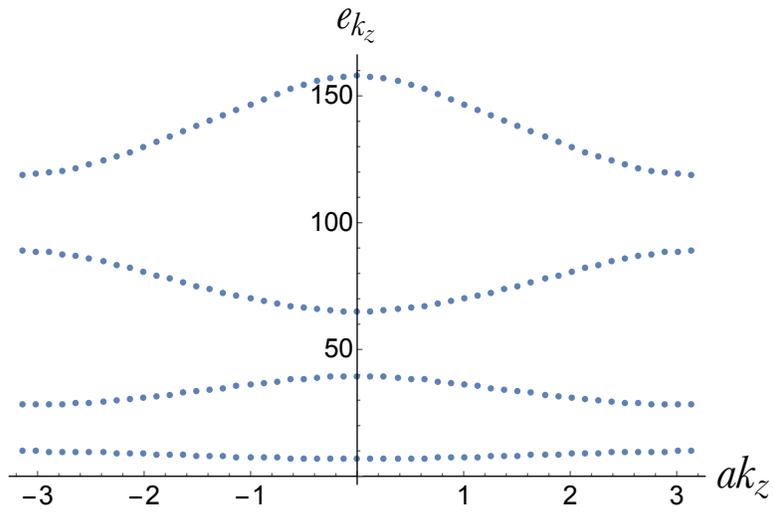


Figura 3.13: Espectro de energía en la dirección  $z$ .  $P = 10$ .

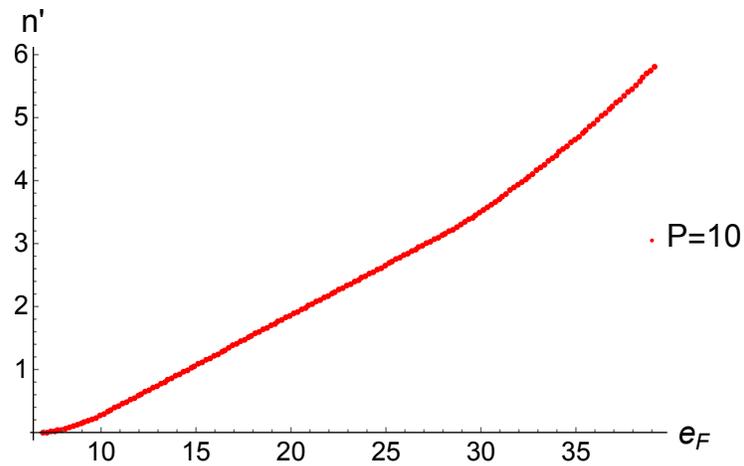


Figura 3.14: Densidad de partículas como función de la energía de Fermi para  $P = 10$  con energías de Fermi entre la primera y la segunda banda. La gráfica se curva para  $e_F$  en la primera banda, se hace lineal en la región donde las energías de Fermi toman valores dentro del gap y vuelve a ser curva en la región de energías en la segunda banda.

Como es de esperarse, cuando el valor de  $P$  se hace cada vez mayor, el ancho de banda permitida disminuye y el valor del gap aumenta, provocando que las regiones donde la gráfica de  $N$  vs  $e_F$  es lineal sean mayores y las regiones donde se curva apenas sean perceptibles (ver figuras 3.15 y 3.16).

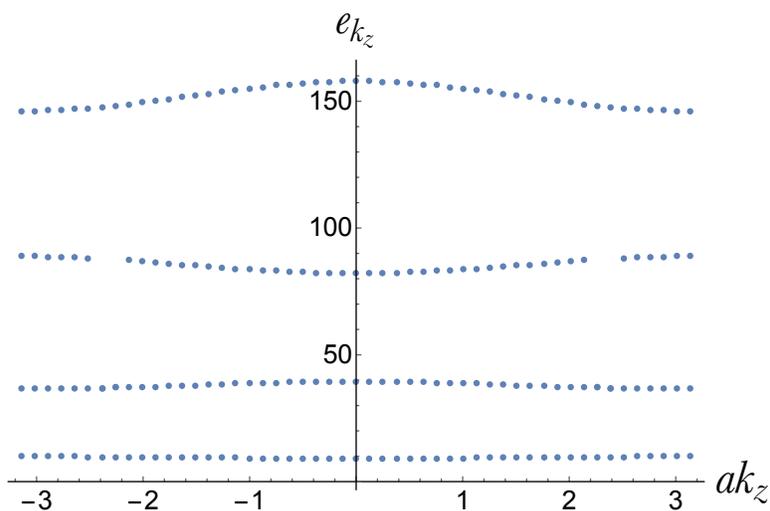


Figura 3.15: Espectro de energías en la dirección  $z$ ,  $P = 50$ .

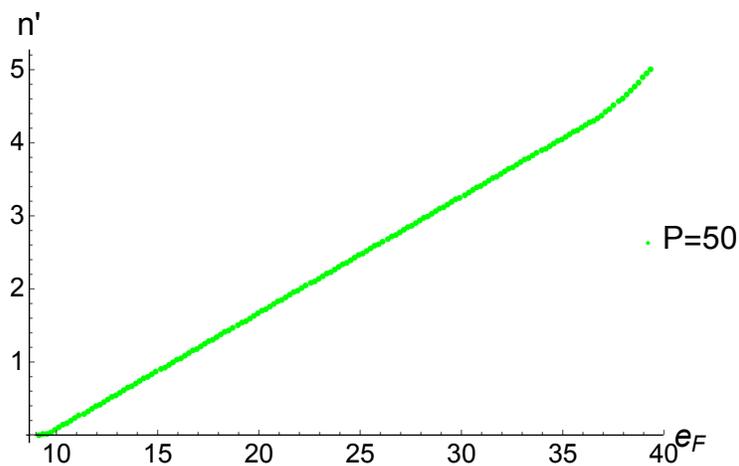


Figura 3.16: Densidad de partículas como función de la energía de Fermi para  $P = 50$  con energías de Fermi entre la primera y segunda banda. La región lineal es mucho más grande respecto a las regiones curvas debido a que el gap aumenta para valores grandes de  $P$ .

### 3.3. Energía de ligadura del par de Cooper en la presencia de potencial externo tipo Kronig-Penney en una dirección

#### 3.3.1. Caso: Momento de centro de masa igual a cero ( $\mathbf{K} = 0$ )

Como se mostró en el Capítulo 2, a partir de la expresión (2.43), usando la expresión (2.44) y la aproximación (2.46), Cooper llega a la expresión para la energía de ligadura del par (2.48) a saber

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2} \ln \frac{2E_F + 2\hbar\omega_D - E_r}{2E_F - E_r}, \quad (3.15)$$

al hacer adimensional dicha ecuación con  $\epsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ , como se ha venido haciendo, se obtiene

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2} \ln \frac{2e_F + 2e_D - e_r}{2e_F - e_r}, \quad (3.16)$$

donde  $e_F = \frac{E_F}{\epsilon_0}$ ,  $e_D = \frac{\hbar\omega_D}{\epsilon_0}$  y  $e_r = \frac{E_r}{\epsilon_0}$ .

Y como se demostró, si en lugar de utilizar la aproximación (2.46) se utiliza la densidad de estados (2.52) en 3D se llega a la expresión

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{E_F^{\frac{1}{2}}} \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \frac{\epsilon^{\frac{1}{2}}}{2\epsilon - E_r} d\epsilon. \quad (3.17)$$

Por otro lado, a partir de (2.43), utilizando (2.44) en términos de  $k$ , se tiene que

$$\frac{1}{V} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_{\Omega(e_f)} \frac{d^3k}{\frac{\hbar^2}{m}k^2 - E_r} \quad (3.18)$$

multiplicando ambos lados de (3.18) por  $\frac{1}{N(E_F)} = \frac{\hbar^3\pi^2}{\sqrt{2}L^3m^{\frac{3}{2}}E_F^{\frac{1}{2}}}$  se llega a

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\hbar^3}{2^3\pi\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}E_F^{\frac{1}{2}}} \int_{\Omega(e_f)} \frac{d^3k}{\frac{\hbar^2}{m}k^2 - E_r} \quad (3.19)$$

que una vez adimensionalizada se convierte en

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2\pi e_F^{\frac{1}{2}}} \int_{\Omega(e_f)} \frac{d^3(ak)}{2a^2k^2 - e_r} \quad (3.20)$$

Dado que la simetría de la superficie de Fermi en el espacio  $\mathbf{k}$ , para el caso en que  $P \neq 0$ , es cilíndrica, es apropiado resolver la ecuación (3.20) en un sistema de coordenadas cilíndricas, sin embargo, con el fin de corroborar que en el caso en que  $P = 0$  los resultados en dicho sistema coordenado se reducen a los obtenidos con coordenadas esféricas, escribimos primeramente la ecuación (3.20) en esféricas para posteriormente reescribirla usando la simetría axial.

En coordenadas esféricas  $d^3(ak) = a^2k_\rho^2 \sin(k_\theta) d(ak_\rho) d(k_\varphi) d(k_\theta)$  por lo que al integrar de la esfera de radio  $ak_F$  a la esfera de radio  $ak_F + ak_D$  la ecuación (3.20) se convierte en

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2\pi e_F^{\frac{1}{2}}} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_{ak_F}^{a(k_F+k_D)} \frac{a^2k_\rho^2 \sin(k_\theta) d(ak_r) d(k_\varphi) d(k_\theta)}{2a^2k_\rho^2 - e_r} \quad (3.21)$$

por lo que

$$\frac{1}{\lambda} = 2 \frac{1}{e_F^{\frac{1}{2}}} \int_{ak_F}^{a(k_F+k_D)} \frac{a^2k_\rho^2 da k_\rho}{2a^2k_\rho^2 - e_r} \quad (3.22)$$

con  $ak_F = \sqrt{e_F}$  y  $a(k_F + k_D) = \sqrt{ef + ed}$

En coordenadas cilíndricas  $d^3(ak) = ak_r d(ak_r) d(k_\varphi) d(ak_z)$  y la correspondencia entre el sistema de coordenadas cilíndricas y esféricas está dado por las ecuaciones

$$\begin{aligned} ak_\rho &= \sqrt{(ak_r)^2 + (ak_z)^2}, \\ k_\varphi &= k_\varphi, \\ k_\theta &= \tan^{-1} \left( \frac{k_r}{k_z} \right), \end{aligned} \quad (3.23)$$

donde se han elegido los ejes coordenados como en la figura 3.17, por lo que la ecuación (3.20) en este sistema coordenado se escribe como

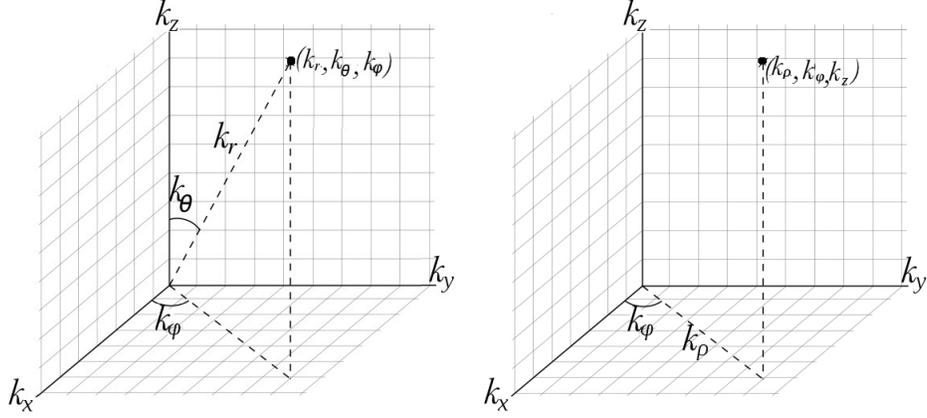


Figura 3.17: a) Coordenadas esféricas en el espacio  $\mathbf{k}$  y ejes cartesianos relacionados. b) Coordenadas cilíndricas en el espacio  $\mathbf{k}$  y ejes cartesianos relacionados.

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{2\pi}{2\pi e_F^{\frac{1}{2}}} \left[ \left( 2 \int_0^{ak_F} \int_{h_1}^{h_2} \frac{ak_r \, dak_r \, dak_z}{2(ak_r)^2 + 2(ak_z)^2 - e_r} \right) + \left( 2 \int_{ak_F}^{ak_F+ak_D} \int_{h_2}^0 \frac{ak_r \, dak_r \, dak_z}{2(ak_r)^2 + 2(ak_z)^2 - e_r} \right) \right], \quad (3.24)$$

donde  $h_1 = \sqrt{(ak_F)^2 - (ak_z)^2}$  y  $h_2 = \sqrt{(ak_F + ak_D)^2 - (ak_z)^2}$ .

Entonces

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2e_F^{\frac{1}{2}}} \left\{ \int_0^{ak_F} \ln \left[ \frac{2(ak_F + ak_D)^2 - e_r}{2(ak_F)^2 - e_r} \right] dak_z - \int_{ak_F}^{ak_F+ak_D} \ln \left[ \frac{2(ak_F + ak_D)^2 - e_r}{2(ak_z)^2 - e_r} \right] dak_z \right\} \quad (3.25)$$

y finalmente la expresión a resolver en coordenadas cilíndricas es

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2e_F^{\frac{1}{2}}} \left\{ ak_F \ln \left[ \frac{2(ak_F + ak_D)^2 - e_r}{2(ak_F)^2 - e_r} \right] - \int_{ak_F}^{ak_F+ak_D} \ln \left[ \frac{2(ak_F + ak_D)^2 - e_r}{2(ak_z)^2 - e_r} \right] dak_z \right\}. \quad (3.26)$$

Para el caso en que  $P \neq 0$ , la ecuación (3.26) es de la forma

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2e_F^{\frac{1}{2}}} \left\{ ak_F \ln \left[ \frac{2(ak_F + ak_D)^2 - e_r}{2(ak_F)^2 - e_r} \right] - \int_{ak_F}^{a(k_F+k_D)} \ln \left[ \frac{2(ak_F + ak_D)^2 - e_r}{2e_{k_z} - e_r} \right] dak_z \right\}. \quad (3.27)$$

Es fácil ver que el primer término del miembro derecho de (3.27) corresponde al resultado que se obtiene con la aproximación de Cooper y el segundo se reduce al segundo término de (3.26) en el caso en que  $P = 0$  pues  $e_{k_z} = (ak_z)^2$  entonces, cuando  $P \neq 0$ , es este el término que contribuye a un cambio respecto al resultado de Cooper en la dependencia de  $1/\lambda$  con la energía del par  $e_r$  o viceversa.

En la figura 3.18 se observa como cambia la gráfica de  $e_r$  vs  $1/\lambda$  al mantener fija la energía de Fermi y variar el valor de  $P$ .

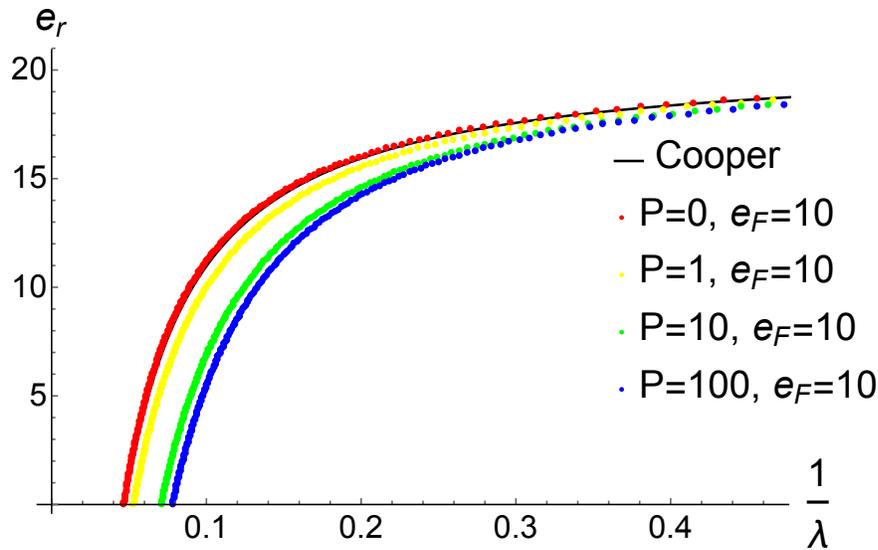


Figura 3.18: Gráficas de  $e_r$  vs  $1/\lambda$  con energía de Fermi en el límite de la primera banda para distintos valores de  $P$ .

En las figuras 3.19, 3.20, 3.21 y 3.22 se muestran las superficies de Fermi y la comparación de la energía de Fermi, correspondiente a la superficie dada, con la energía en el espectro de bandas para cada una de las curvas de la figura 3.18.

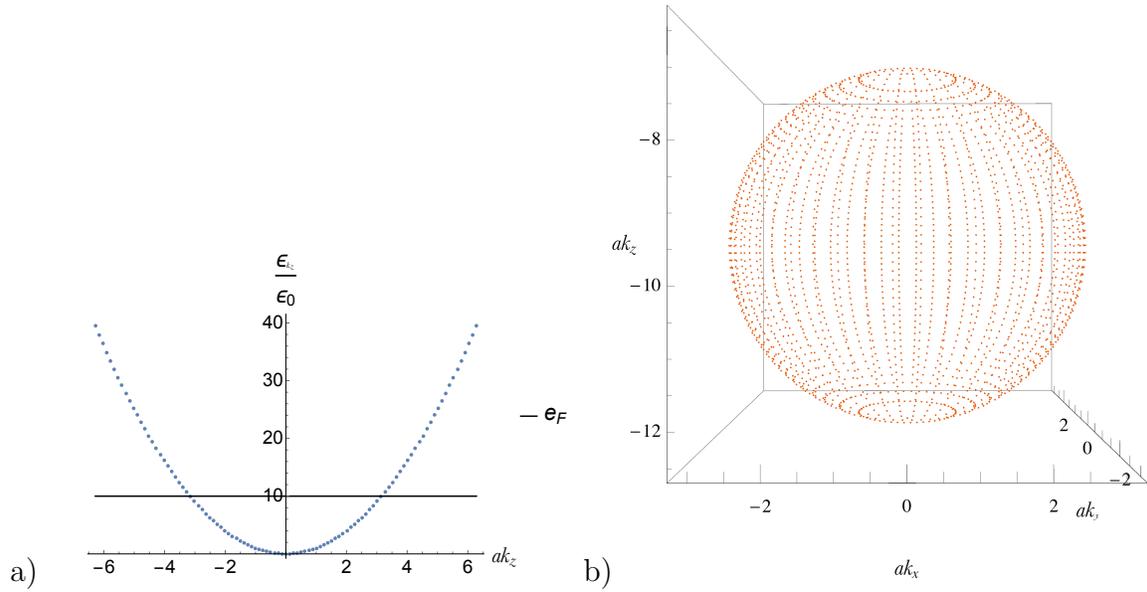


Figura 3.19:  $P = 0$ , correspondiente a la curva de color rojo en la figura 3.18 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas,  $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada  $\approx 10$ .

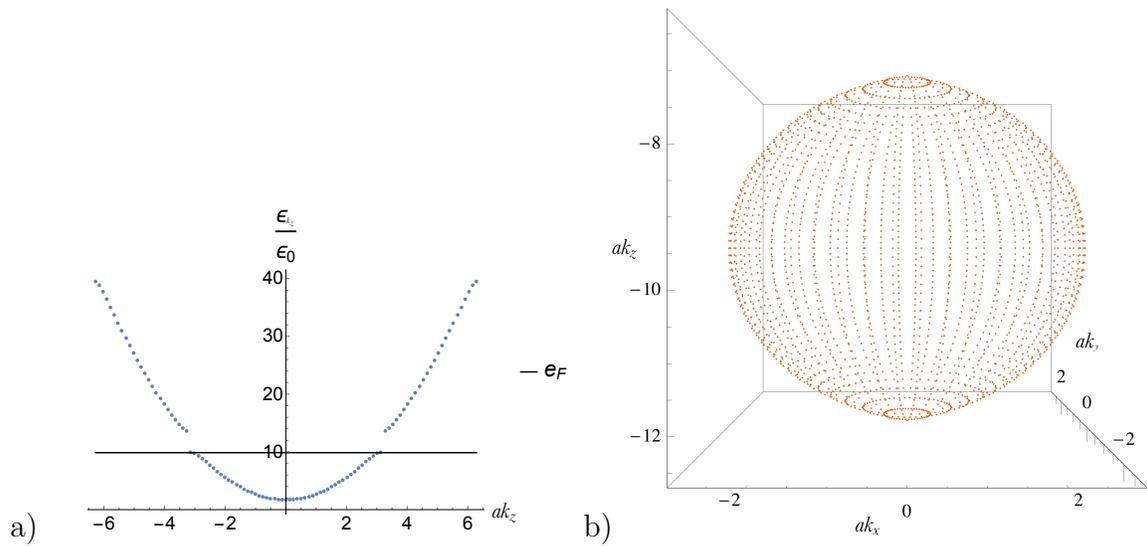


Figura 3.20:  $P = 1$ , correspondiente a la curva de color amarillo en la figura 3.18 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas,  $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada  $\approx 10$ .

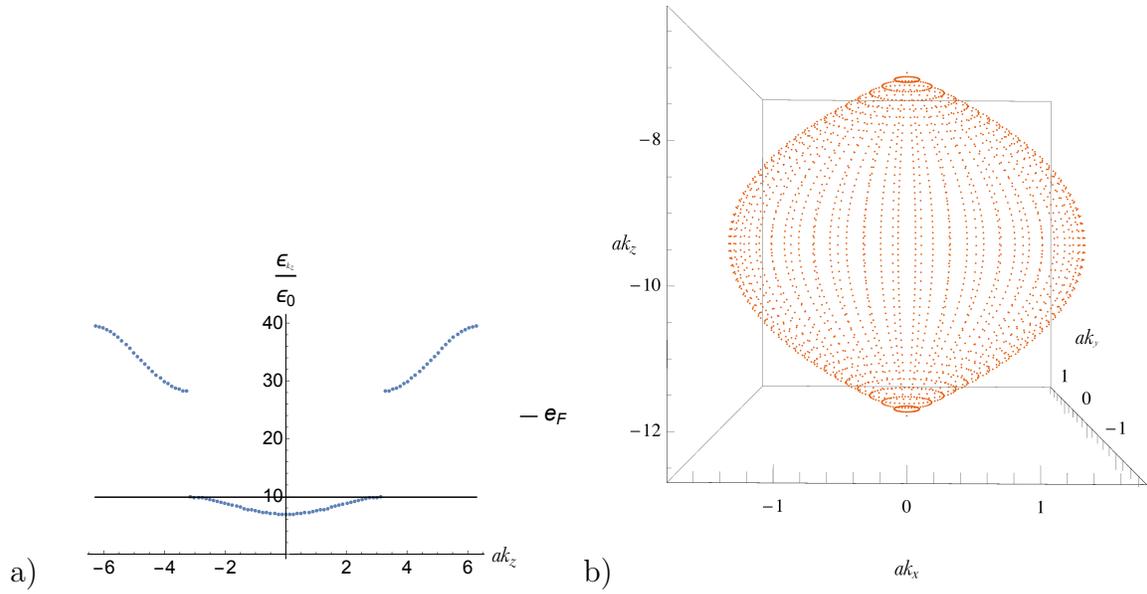


Figura 3.21:  $P = 10$ , correspondiente a la curva de color verde en la figura 3.18 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas,  $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada  $\approx 10$ .

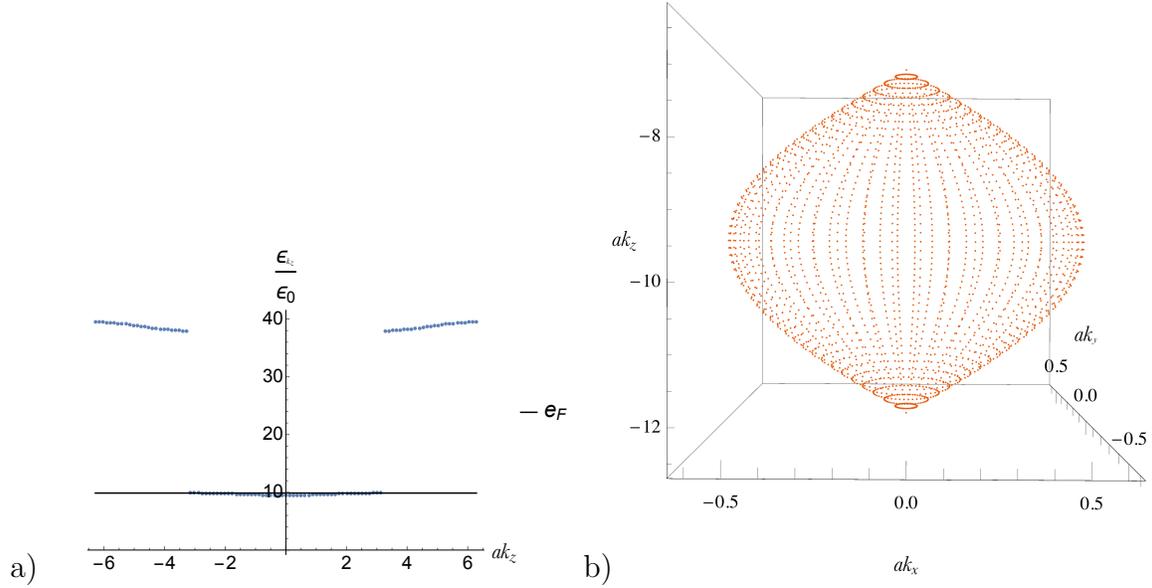


Figura 3.22:  $P = 100$ , correspondiente a la curva de color verde en la figura 3.18 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas,  $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada  $\approx 10$ .

De la figura 3.18 podemos ver que, si tomamos un valor fijo del parámetro de acoplamiento  $\lambda$ , el valor de  $e_r$  disminuye a medida que  $P$  aumenta. Para corroborar esta afirmación en las figuras 3.23 a 3.26 se muestra la gráfica de  $2e_F - e_r$  vs  $P$  para valores físicamente aceptables de la energía de Fermi. Suponiendo que el valor de la distancia entre las barreras de potencial es de  $a = 10 \text{ \AA} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$ , entonces el valor del parámetro de adimensionalización  $\epsilon_0 = \hbar^2/2ma^2 = 6 \times 10^{-21} \text{ J} = 0.037 \text{ eV} = 434.6 \text{ K}$ , en este caso la energía de Fermi tendrá un valor de  $E_F = e_F \epsilon_0$  y la energía de Debye  $\hbar\omega_D = E_D = e_D \epsilon_0$ . Considerando que la energía de Fermi típica en metales es del orden de  $5 \times 10^4 \text{ K}$  y la energía de Debye es del orden de  $10^2 \text{ K}$  (ver referencia [35] p. 478), en la figura 3.23 se grafica  $e_r$  vs  $P$  con  $e_F = 10$  por lo que  $E_F = 4346 \text{ K}$ ,  $e_D = 1$  por lo cual  $E_D = 434.6 \text{ K}$  y  $\lambda = 0.5$ , en 3.24  $e_F = 30$  entonces  $E_F = 13038 \text{ K}$ ,  $E_D = 434.6 \text{ K}$  y  $\lambda = 0.5$ . Es evidente que al aumentar el valor del acoplamiento la energía de ligadura aumenta, esto se muestra en las gráficas 3.25 y 3.26, donde nuevamente se toman los valores  $e_F = 10, 30$  con  $e_D = 1$  pero para un valor de  $\lambda = 2$ .

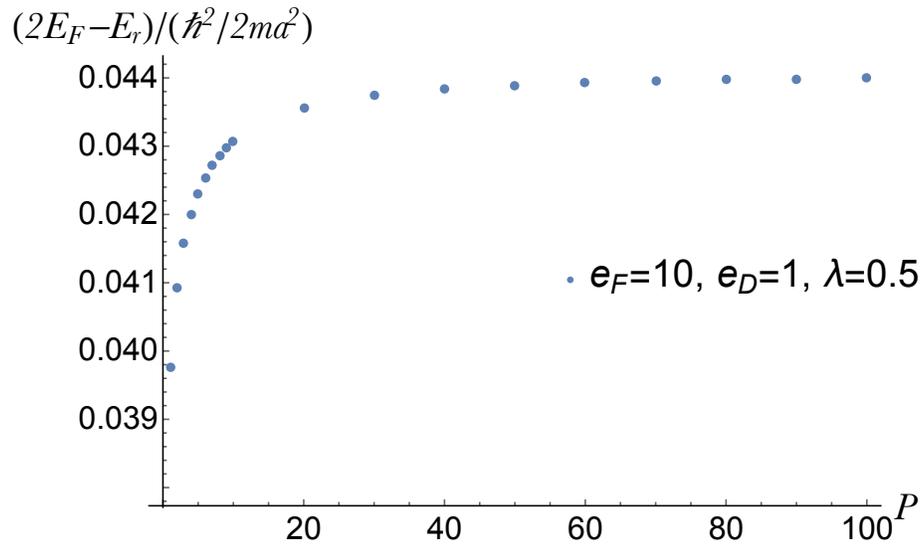


Figura 3.23:  $2e_F - e_r$  vs  $P$  para  $e_F = 10$ ,  $e_D = 1$  y  $\lambda = 0.5$ . En el caso en que  $a = 10 \text{ \AA}$  la energía de Fermi correspondiente es  $E_F = 4346 \text{ K}$  y  $E_D = 434.6 \text{ eV}$ .

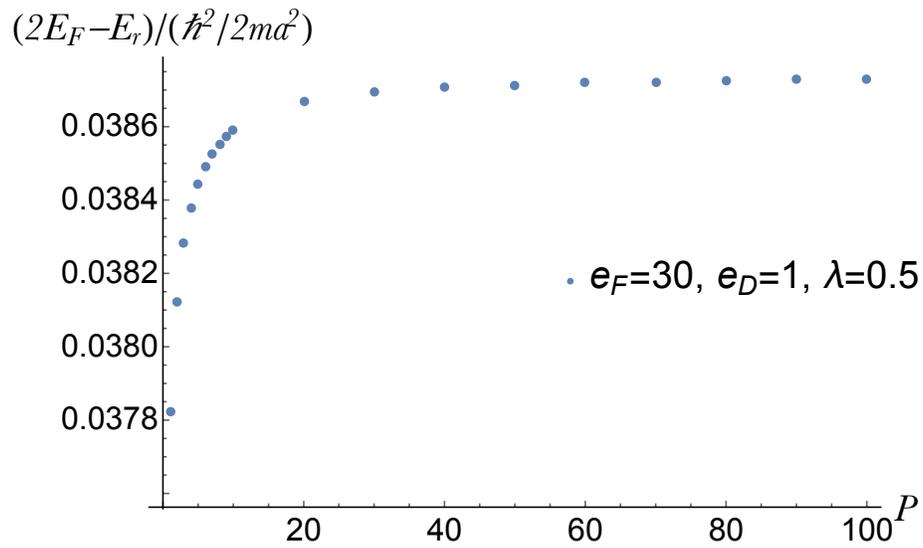


Figura 3.24:  $2e_F - e_r$  vs  $P$  para  $e_F = 30$ ,  $e_D = 1$  y  $\lambda = 0.5$ . En el caso en que  $a = 10 \text{ \AA}$  la energía de Fermi correspondiente es  $E_F = 13038 \text{ K}$  y  $E_D = 434.6 \text{ eV}$ .

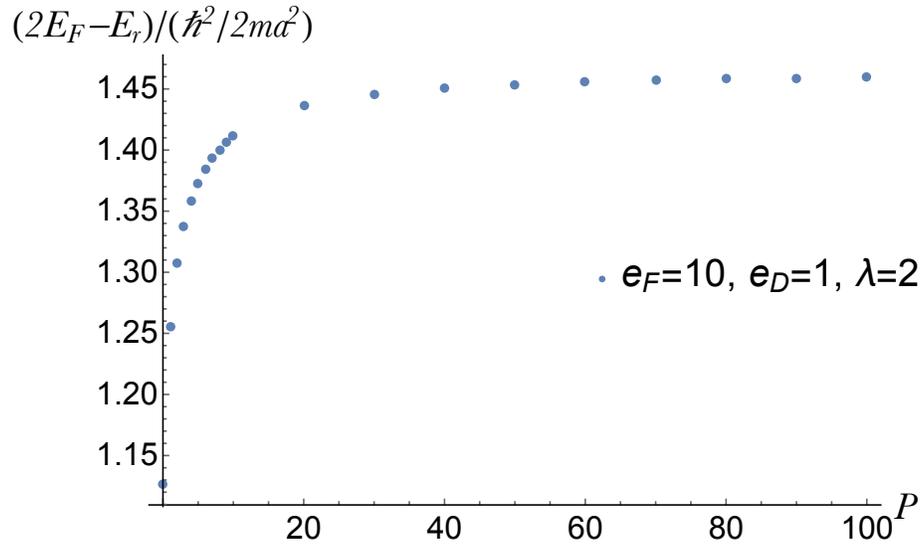


Figura 3.25:  $2e_F - e_r$  vs  $P$  para  $e_F = 10$ ,  $e_D = 1$  y  $\lambda = 2$ . En el caso en que  $a = 10 \text{ \AA}$  la energía de Fermi correspondiente es  $E_F = 4346 \text{ K}$  y  $E_D = 434.6 \text{ eV}$ .

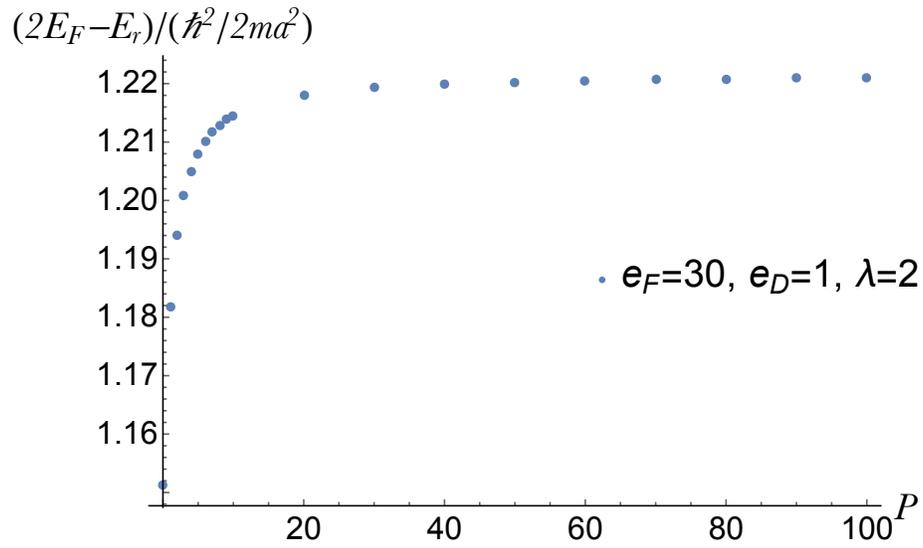


Figura 3.26:  $2e_F - e_r$  vs  $P$  para  $e_F = 10$ ,  $e_D = 1$  y  $\lambda = 2$ . En el caso en que  $a = 10 \text{ \AA}$  la energía de Fermi correspondiente es  $E_F = 13038 \text{ K}$  y  $E_D = 434.6 \text{ eV}$ .

En la figura 3.27 se observa como cambia la gráfica de  $e_r$  vs  $1/\lambda$  al mantener fijo  $P$  y variar el valor de  $e_F$ .

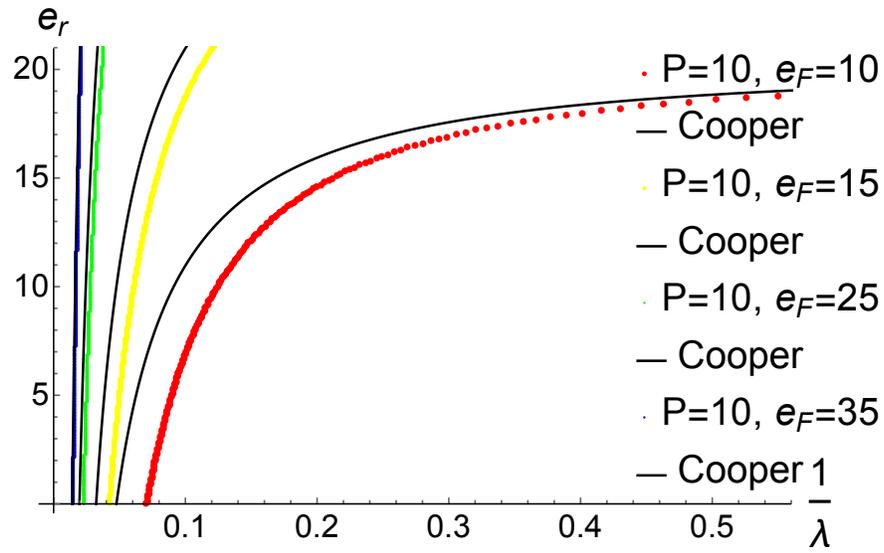


Figura 3.27: Gráficas de  $e_r$  vs  $1/\lambda$  variando el valor de la energía de Fermi con  $P = 10$ . La línea sólida junto a cada curva punteada corresponde a la curva obtenida mediante la expresión de Cooper.

En las figuras 3.28, 3.29, 3.30 y 3.31 se observa la gráfica de  $e_{k_z}$  vs  $a_{k_z}$  señalando el valor de  $e_F$  y la gráfica de la superficie de Fermi correspondiente a cada una de las curvas de la figura 3.27.

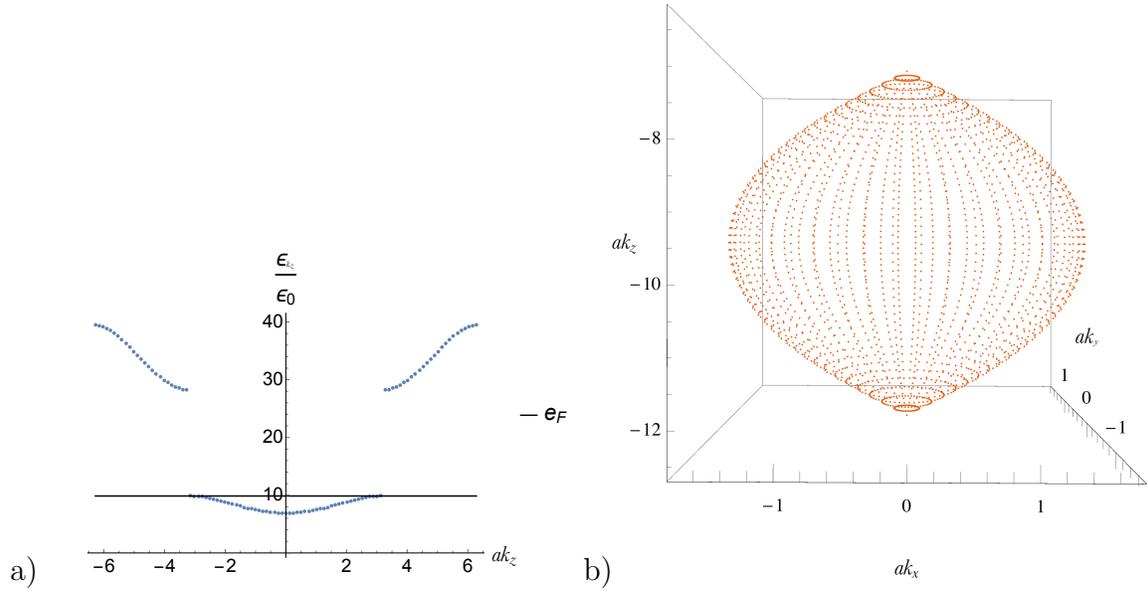


Figura 3.28:  $P = 10$ ,  $e_F = 10$  correspondiente a la curva amarilla en la figura 3.27 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas,  $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada.

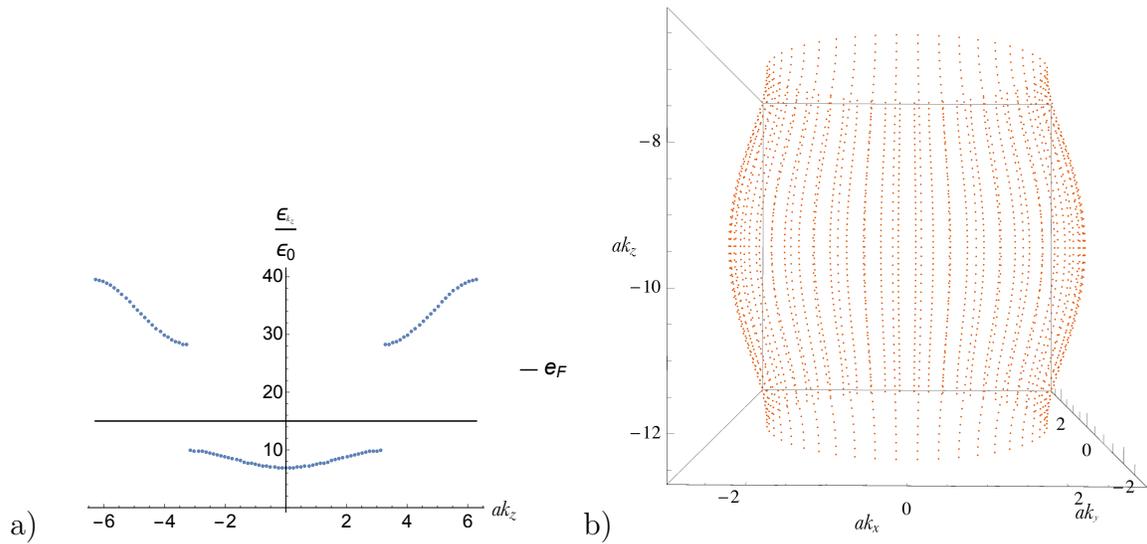


Figura 3.29:  $P = 10$ ,  $e_F = 15$  correspondiente a la curva amarilla en la figura 3.27 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas,  $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada.

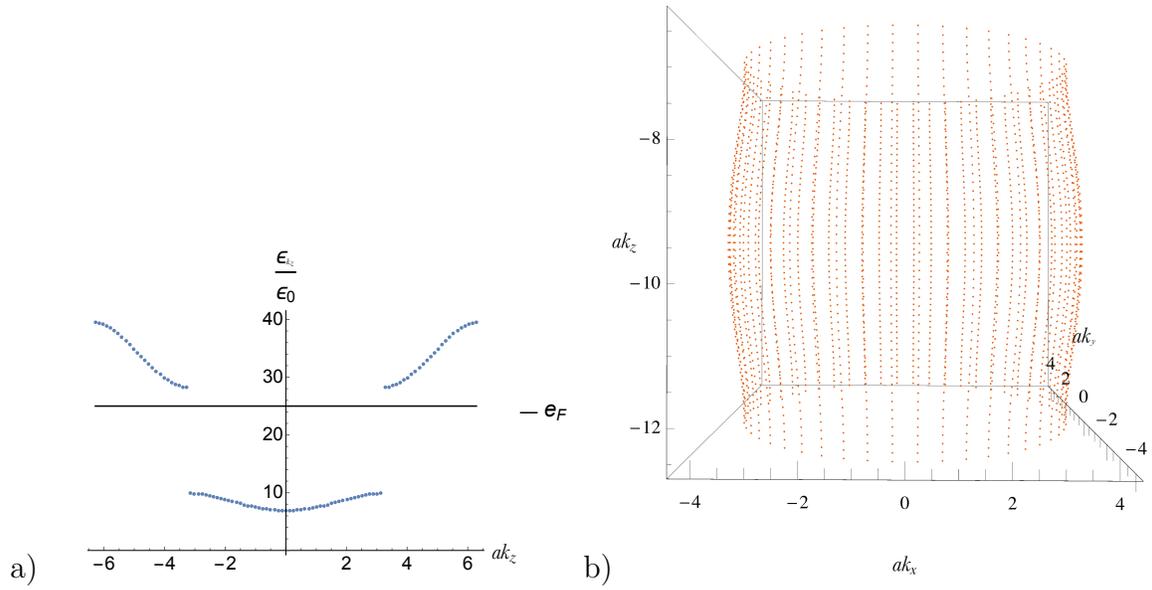


Figura 3.30:  $P = 10$ ,  $e_F = 25$ , correspondiente a la curva verde en la figura 3.27 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas,  $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada.

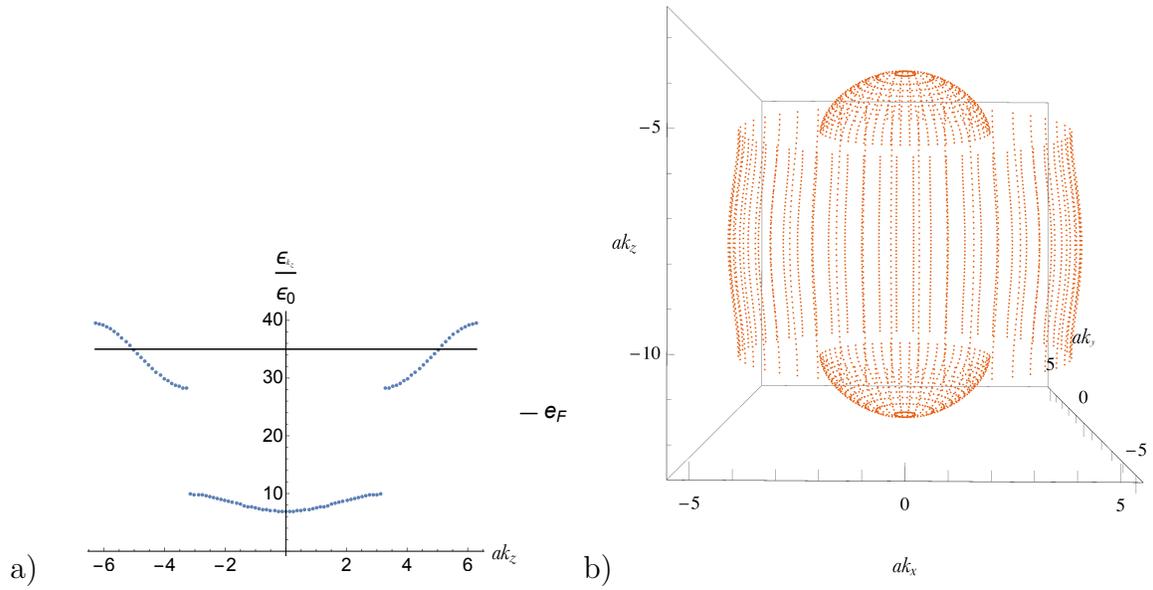


Figura 3.31:  $P = 10$ ,  $e_F = 35$ , correspondiente a la curva verde en la figura 3.27 a) Comparación de la energía de Fermi con las energías en el espectro de bandas,  $\epsilon_{k_z}$ . b) Superficie de Fermi correspondiente a la energía de Fermi dada.

### 3.3.2. Caso: Momento de centro de masa distinto de cero ( $K \neq 0$ )

En el caso en el que el momento del centro de masa del par es distinto de cero, partiendo de la ecuación (2.35) y procediendo de manera análoga a como se hizo para llegar a la ecuación (3.27) se encuentra que en coordenadas cilíndricas

$$\frac{1}{\lambda} = 2 \frac{1}{4e_F^{\frac{1}{2}}} a k_F \ln \left[ \frac{2(a k_F + a k_D)^2 + (a K)^2 / 2 - 2e_F - e_K}{2(a k_F)^2 - K^2 / 2 - 2e_F - e_K} \right]$$

$$- 2 \frac{1}{4e_F^{\frac{1}{2}}} \int_{a k_F}^{a k_F + a k_D} \ln \left[ \frac{2(a k_F + a k_D)^2 + (a K)^2 / 2 - 2e_F - e_K}{2e_{k_z} + K^2 / 2 - 2e_F - e_K} \right] da k_z \quad (3.28)$$

en donde  $e_K \equiv \frac{\mathcal{E}_K}{\epsilon_0}$ ,  $e_F \equiv \frac{E_F}{\epsilon_0}$  y  $e_{k_z} = \frac{E_{k_z}}{\epsilon_0}$

Ya que  $e_r = 2e_F + e_{K=0}$ , para comparar el caso en el que  $K = 0$  con la expresión de Cooper graficamos  $2e_F + e_K$  vs  $1/\lambda$

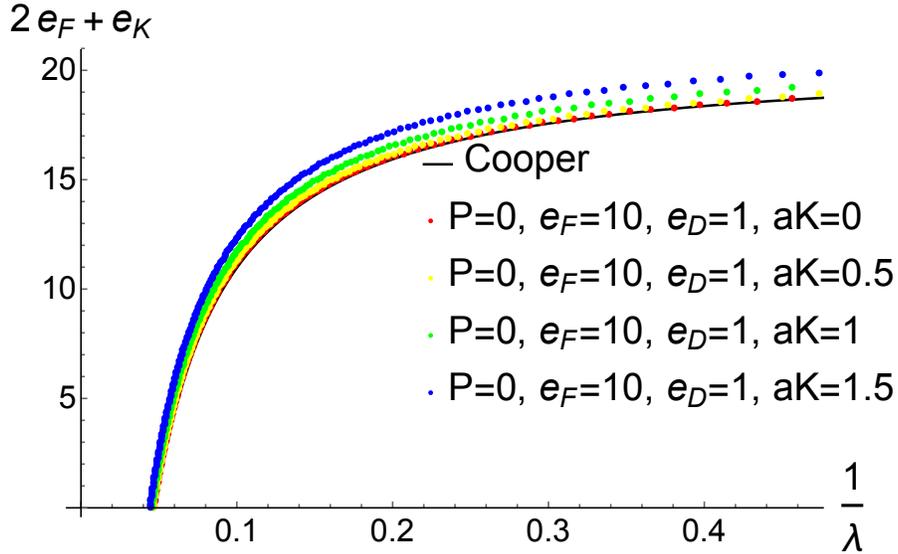


Figura 3.32:  $2e_F + e_K$  vs  $1/\lambda$  para diferentes valores de  $K$  y  $P = 0, e_F = 10, e_D = 1$ .

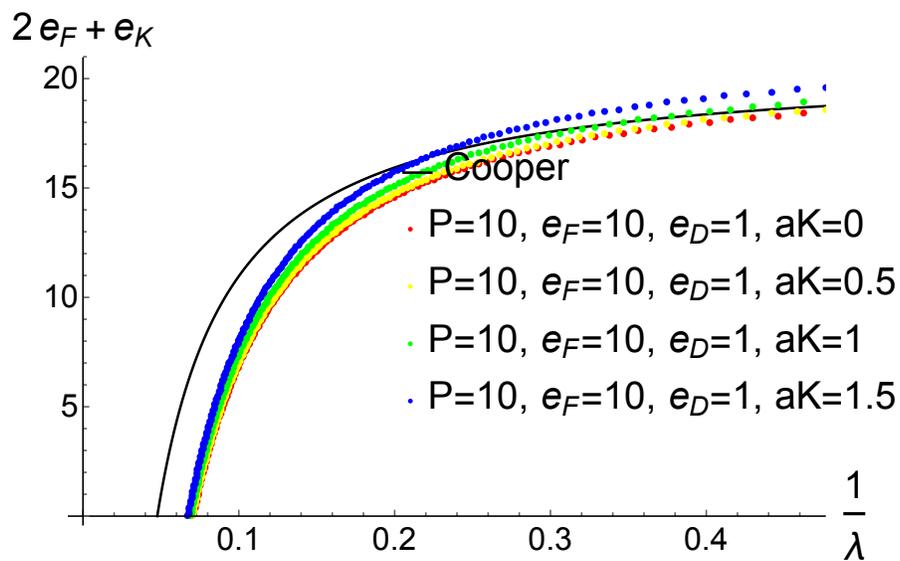


Figura 3.33:  $2e_F + e_K$  vs  $1/\lambda$  para diferentes valores de  $K$ ,  $P = 10$ ,  $e_F = 10$ ,  $e_D = 1$ .

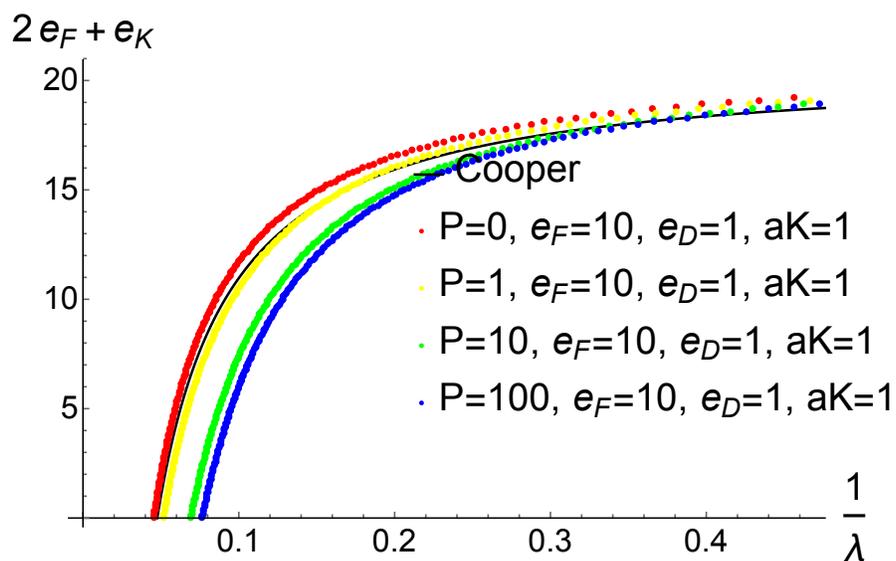


Figura 3.34:  $2e_F + e_K$  vs  $1/\lambda$  para diferentes valores de  $P$ ,  $K = 1$ ,  $e_F = 10$ ,  $e_D = 1$ .

## Capítulo 4

# Conclusiones

De nuestro análisis podemos concluir que la presencia de un potencial periódico en la dirección  $z$  en un gas ideal de fermiones modifica notablemente la estructura y forma de la superficie de Fermi, la simetría de la superficie cambia de esférica, cuando no hay potencial, a una con simetría axial alrededor del eje  $z$ . Dos parámetros muy importantes que afectan la estructura geométrica de la superficie de Fermi son el parámetro impermeabilidad  $P$ , el cual controla el flujo de partículas a través de los planos, y como era de esperarse, la energía de Fermi  $\epsilon_F$  que determina la densidad de partículas en el sistema. Cuando el valor de  $P$  es distinto de cero, la superficie se deforma en la dirección del potencial,  $z$ , y aparecen discontinuidades en ésta cuyo número depende del valor de la energía de Fermi. Si la energía de Fermi se encuentra en algún valor permitido del espectro de bandas de Kronig-Penney, la superficie de Fermi correspondiente es “cerrada” (ver figuras 3.2, 3.3, 3.4, 3.5 y 3.6) y pueden existir discontinuidades en la dirección  $z$  dependiendo del número de zonas prohibidas que están contenidas hasta esta energía. Si la energía de Fermi corresponde con una energía en la región prohibida del espectro de Kronig-Penney la superficie de Fermi será “abierta” (ver figuras 3.7, 3.8 y 3.9) y nuevamente el número de discontinuidades depende del número de zonas prohibidas presentes. Cuando el valor de  $P = 0$  se recupera el caso de la superficie de Fermi esférica y conforme  $P$  aumenta, las brechas de energía prohibidas tienen una magnitud cada vez mayor, por lo que la deformación de la superficie de Fermi es análoga a la descrita, con la excepción de que las discontinuidades son más grandes haciendo la deformación más conspicua.

La relación entre la densidad de partículas y la energía de Fermi también se vio modificada por el potencial periódico que se ha introducido. Primeramente se encuentra que, a medida que el parámetro de impenetrabilidad crece, la densidad de partículas disminuye para un valor de la energía de Fermi dado (ver figura 3.12), lo cual es de

esperarse si se observa que el volumen contenido por la superficie de Fermi en el espacio  $\mathbf{k}$  disminuye en este caso. Cuando  $P = 0$  se recupera nuevamente el resultado del gas de partículas libres, a saber,  $n = \frac{1}{3\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \epsilon_F \right)^{\frac{3}{2}}$ . Además se encontró que la dependencia de la energía de Fermi con la densidad de partículas, cuando  $P \neq 0$ , es lineal en las regiones donde la energía de Fermi corresponde con una energía en la región prohibida del espectro de Kronig-Penney y la dependencia es no lineal cuando la energía de Fermi se encuentra en una región permitida.

En relación a las energías de ligadura del par de Cooper se puede concluir que, cuando se eligió una energía de Fermi constante y se varió el valor de  $P$ , el valor de la energía de ligadura del par aumenta y el acoplamiento disminuyen conforme  $P$  incrementa (ver figura 3.18). De manera inversa, al mantener fijo el parámetro  $P$  y aumentar la energía de Fermi la energía de ligadura disminuye y el acoplamiento aumenta tendiendo a los valores predichos por Cooper (ver figura 3.27). En el caso en que  $P = 0$  se recuperaron los resultados de Cooper exactamente. Estos resultados sugieren que el confinamiento a estructuras de tipo laminar incrementa la estabilidad del par de Cooper por lo que se puede esperar temperaturas críticas más altas como se puede inferir de la ecuación (B.18).

Al final de esta tesis se introdujo someramente el caso en que el momento del centro de masa del par es distinto de cero ( $K \neq 0$ ). Para  $P = 0$  se observa que un incremento en el valor de  $K$  implica una disminución en la energía de ligadura del par, mientras que, para un valor fijo de  $P$  distinto de cero la energía de ligadura es mayor que en el caso del modelo de Cooper, sin embargo se vuelve menor a medida que el valor del momento del centro de masa aumenta. Además se encontró que para un valor fijo de  $K$  mayor a cero la energía de ligadura del par es menor que en el caso de Cooper pero incrementa a medida que el valor del parámetro de impermeabilidad,  $P$ , aumenta. Como continuación a este proyecto es interesante calcular los efectos del potencial periódico en otras cantidades importantes de la teoría BCS como la relación de dispersión del par, la ecuación del gap superconductor, la energía de condensación y ver la forma en que se modifican las llamadas “Relaciones Universales de la Teoría BCS” (ver Apéndices A y B).

## Apéndice A

# Ecuación del gap superconductor a $T = 0$

Debido al éxito del modelo de Cooper en la producción de un estado ligado, BCS sugiere que la función de onda del estado base superconductor debe ser construida a partir de pares de electrones y proponen una función de la forma

$$|\psi_{BCS}\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger) |0\rangle \quad (\text{A.1})$$

donde  $|0\rangle$  es el estado vacío y  $c_{k\sigma}^\dagger$  son los operadores de Fermi de creación para un electrón con momento  $\mathbf{k}$  y espín  $\sigma (= \uparrow \text{ ó } \downarrow)$  los cuales cumplen con las siguientes relaciones de anticonmutación

$$c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma'}^\dagger + c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k\sigma}^\dagger = 0, \quad (\text{A.2})$$

$$c_{k\sigma} c_{k'\sigma'} + c_{k'\sigma'} c_{k\sigma} = 0, \quad (\text{A.3})$$

$$c_{k\sigma} c_{k'\sigma'}^\dagger + c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k\sigma} = \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (\text{A.4})$$

$$n_{k\sigma} = c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}. \quad (\text{A.5})$$

Las cantidades  $u_k$  y  $v_k$  no son independientes ya que están fijadas de acuerdo a la condición de normalización  $\langle \psi_{BCS} | \psi_{BCS} \rangle = 1$  lo cual da

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1. \quad (\text{A.6})$$

El hamiltoniano reducido que utiliza BCS es el siguiente

$$H_R = \sum_{k,\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \sum_{k,k'} V_{kk'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \quad (\text{A.7})$$

con  $\xi_k$  la energía de los fermiones medida a partir de la energía de Fermi  $E_F$ .

El primer término de (A.7) censa el número de estados ocupados por electrones que entran en el problema y anota la energía que tiene cada uno, el segundo término describe como interactúan los electrones para formar pares (se destruyen los dos electrones que forman un par de Cooper y se crea un nuevo par). El potencial que propicia esto es  $V_{kk'}$ .

La energía del estado base se obtiene como

$$\begin{aligned} E' &= \langle \psi_{BCS} | H_R | \psi_{BCS} \rangle \\ &= \langle \psi_{BCS} | H_T | \psi_{BCS} \rangle + \langle \psi_{BCS} | H_V | \psi_{BCS} \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Introduciendo los operadores

$$b_{k\uparrow}^\dagger = c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \quad (\text{A.9})$$

y

$$b_{k\uparrow} = c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \quad (\text{A.10})$$

los cuales obedecen las reglas de conmutación dadas por

$$b_k^\dagger b_{k'}^\dagger - b_{k'}^\dagger b_k^\dagger = 0, \quad (\text{A.11})$$

$$b_k b_k^\dagger - b_k^\dagger b_k = 1 - n_{k\uparrow} - n_{-k\downarrow}, \quad (\text{A.12})$$

$$b_k b_{k'} - b_{k'} b_k = 0 \quad (\text{A.13})$$

podemos escribir el operador total de número como

$$n_{k\uparrow} + n_{k\downarrow} = 2b_k^\dagger b_k. \quad (\text{A.14})$$

En términos de estos operadores el hamiltoniano (A.7) se escribe como

$$\begin{aligned}
H_R &= 2 \sum_k \xi_k b_k^\dagger b_k - \sum_{k,k'} V_{kk'} b_k^\dagger b_{k'} \\
&= H_T + H_V
\end{aligned} \tag{A.15}$$

y la ecuación (A.1) como

$$|\psi_{BCS}\rangle = \prod_k (u_k + v_k b_k^\dagger) |0\rangle. \tag{A.16}$$

Resolviendo para el valor esperado de  $H_T$

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{BCS} | H_T | \psi_{BCS} \rangle &= \langle 0 | \left[ \prod_q (u_q^* + v_q^* b_q) \left( 2 \sum_k \xi_k b_k^\dagger b_k \right) \prod_q (u_q + v_q b_q^\dagger) \right] |0\rangle \\
&= 2 \sum_k \xi_k \langle 0 | \left[ (u_k^* + v_k^* b_k) (b_k^\dagger b_k) (u_k + v_k b_k^\dagger) \times \prod_{q \neq k} (u_q^* + v_q^* b_q) (u_q + v_q b_q^\dagger) \right] |0\rangle \tag{A.17}
\end{aligned}$$

Haciendo explícita la multiplicación de los factores en el producto sobre  $q \neq k$  se tiene

$$u_q^2 + u_q^* v_q b_q^\dagger + v_q^* u_q b_q + v_q^2 b_q b_q^\dagger \tag{A.18}$$

Cuando se toma el valor esperado  $\langle 0 | |0\rangle$  de la expresión anterior los dos términos de en medio dan cero. Usando las reglas de conmutación (A.11), (A.12) y (A.13), el último término se puede escribir como  $v_q^2 b_q b_q^\dagger = v_q^2 (b_q^\dagger b_q + 1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow})$  que al operar sobre el vacío nos da  $v_q^2$ . Por lo tanto este factor en el que  $q \neq k$  se reduce a  $u_q^2 + v_q^2 = 1$ .

Entonces

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{BCS} | H_T | \psi_{BCS} \rangle &= 2 \sum_k \xi_k \langle 0 | \left[ (u_k^* + v_k^* b_k) (b_k^\dagger b_k) (u_k + v_k b_k^\dagger) \right] |0\rangle \\
&= 2 \sum_k \xi_k \langle 0 | \left[ (u_k^2 b_k^\dagger b_k + u_k^* v_k b_k^\dagger b_k b_k^\dagger + v_k^* u_k b_k b_k^\dagger b_k + v_k^2 b_k b_k^\dagger b_k b_k^\dagger) \right] |0\rangle \tag{A.19}
\end{aligned}$$

Los tres primeros términos de (A.19) dan cero y el último se escribe como

$$v_k^2 b_k b_k^\dagger b_k b_k^\dagger = v_k^2 b_k b_k^\dagger (b_k^\dagger b_k + 1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) \quad (\text{A.20})$$

que al operar sobre el vacío da  $v_k^2$ . Por lo tanto

$$\langle \psi_{BCS} | H_T | \psi_{BCS} \rangle = 2 \sum_k \xi_k v_k^2. \quad (\text{A.21})$$

Calculando ahora el valor esperado de  $H_V$  se tiene que

$$\langle \psi_{BCS} | H_V | \psi_{BCS} \rangle = \langle 0 | \left[ \prod_q (u_q^* + v_q^* b_q) \left( \sum_{k,k'} V_{kk'} b_k^\dagger b_{k'} \right) \prod_q (u_q + v_q b_q^\dagger) \right] | 0 \rangle \quad (\text{A.22})$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{k,k'} V_{kk'} \langle 0 | [(u_k^* + v_k^* b_k)(u_{k'}^* + v_{k'}^* b_{k'}) (b_k^\dagger b_{k'}) (u_k + v_k b_k^\dagger)(u_{k'} + v_{k'} b_{k'}^\dagger)] \\ &\quad \times \prod_{q \neq k, k'} (u_q^* + v_q^* b_q)(u_q + v_q b_q^\dagger)] | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

de forma análoga al caso anterior, el factor donde  $q \neq k, k'$  se reduce a  $u_q^2 + v_q^2 = 1$ . Entonces se tiene que

$$\begin{aligned} \langle \psi_{BCS} | H_V | \psi_{BCS} \rangle &= - \sum_{k,k'} V_{kk'} \langle 0 | [(u_k^* + v_k^* b_k)(u_{k'}^* + v_{k'}^* b_{k'}) (b_k^\dagger b_{k'}) \\ &\quad (u_k + v_k b_k^\dagger)(u_{k'} + v_{k'} b_{k'}^\dagger)] | 0 \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

$$\begin{aligned} &= - \sum_{k,k'} V_{kk'} \langle 0 | (u_k^* u_{k'}^* + u_k^* v_{k'}^* b_{k'} + u_{k'}^* v_k^* b_k + v_k^* v_{k'}^* b_k b_{k'}) (b_k^\dagger b_{k'}) \\ &\quad (u_k u_{k'} + u_k v_{k'} b_k^\dagger + v_k u_{k'} b_k^\dagger + v_k v_{k'} b_k^\dagger b_{k'}^\dagger) | 0 \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Al hacer el producto de los términos dentro del bra-ket en la ecuación (A.25) se sabe que aquellos que tienen un número distinto de operadores de creación que de aniquilación dan un valor de cero al operar sobre el vacío. Los términos que no son de esta forma se escriben a continuación

$$\begin{aligned}
& -\sum_{k,k'} V_{kk'} \langle 0 | (u_k^* u_{k'}^* u_k u_{k'} b_k^\dagger b_{k'}^\dagger + u_k^* v_{k'}^* u_k v_{k'} b_{k'}^\dagger b_k^\dagger + u_k^* v_{k'}^* v_k u_{k'} b_{k'}^\dagger b_k^\dagger b_k^\dagger \\
& + u_{k'}^* v_k^* u_k v_{k'} b_k b_{k'}^\dagger b_{k'}^\dagger + u_{k'}^* v_k^* v_k u_{k'} b_k b_{k'}^\dagger b_{k'}^\dagger + v_k^* v_{k'}^* v_k v_{k'} b_k b_{k'}^\dagger b_{k'}^\dagger b_k^\dagger b_{k'}^\dagger) | 0 \rangle . \quad (\text{A.26})
\end{aligned}$$

El primer término de (A.26) desaparece ya que  $b_{k'}|0\rangle = 0$ . Usando nuevamente las reglas de conmutación (A.11), (A.12) y (A.13) los operadores en el segundo término se escriben como

$$b_{k'} b_k^\dagger b_{k'}^\dagger b_k^\dagger | 0 \rangle = b_{k'} b_k^\dagger (b_{k'}^\dagger b_{k'} + 1 - n_{k'\uparrow} - n_{k'\downarrow}) | 0 \rangle = b_{k'} b_k^\dagger | 0 \rangle = b_k^\dagger b_{k'} | 0 \rangle = 0$$

lo anterior debido a que el operador de número al operar sobre el vacío da cero. De igual forma los operadores del tercer término se escriben como

$$b_{k'} b_k^\dagger b_{k'}^\dagger b_k^\dagger | 0 \rangle = b_{k'} b_k^\dagger (b_k^\dagger b_{k'}) | 0 \rangle = 0.$$

Para el cuarto término se tiene

$$\begin{aligned}
b_k b_{k'}^\dagger b_{k'}^\dagger b_k^\dagger | 0 \rangle &= b_k b_{k'}^\dagger (b_{k'}^\dagger b_{k'} + 1 - n_{k'\uparrow} - n_{k'\downarrow}) | 0 \rangle = b_k b_{k'}^\dagger | 0 \rangle \\
&= b_k^\dagger b_k + 1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow} | 0 \rangle = 1,
\end{aligned}$$

el quinto término

$$b_k b_{k'}^\dagger b_{k'}^\dagger b_k^\dagger | 0 \rangle = b_k b_{k'}^\dagger b_{k'}^\dagger b_{k'} | 0 \rangle = 0$$

y para el último término se tiene que

$$b_k b_{k'}^\dagger b_{k'}^\dagger b_k^\dagger b_{k'}^\dagger | 0 \rangle = b_k b_{k'}^\dagger b_{k'}^\dagger b_k^\dagger b_{k'}^\dagger | 0 \rangle = b_k b_{k'}^\dagger b_k^\dagger b_{k'}^\dagger (b_{k'}^\dagger b_{k'} + 1 - n_{k'\uparrow} - n_{k'\downarrow}) | 0 \rangle$$

$$= b_k b_{k'} b_k^\dagger b_k^\dagger |0\rangle = b_k b_k^\dagger b_{k'} b_k^\dagger |0\rangle = b_k b_k^\dagger b_k^\dagger b_{k'} |0\rangle = 0.$$

El único término que sobrevive de (A.26) es el cuarto, por lo que

$$\langle \psi_{BCS} | H_V | \psi_{BCS} \rangle = - \sum_{k,k'} V_{kk'} u_{k'}^* v_k^* u_k v_{k'}. \quad (\text{A.27})$$

Por lo tanto de (A.8), (A.21) y (A.27) se tiene que

$$E' = 2 \sum_k \xi_k v_k^2 - \sum_{k,k'} u_k^* v_k u_{k'}^* v_{k'} V_{kk'}. \quad (\text{A.28})$$

Haciendo el cambio de variable  $u_k = \cos\theta_k$ ,  $v_k = \sin\theta_k$  la ecuación (A.28) se puede escribir como

$$E' = 2 \sum_k \xi_k \sin^2\theta_k - \frac{1}{4} \sum_{k,k'} V_{kk'} \sin 2\theta_k \sin 2\theta_{k'} \quad (\text{A.29})$$

derivando  $\frac{\partial E'}{\partial \theta_k}$  y minimizando se tiene

$$2\xi_k \sin 2\theta_k - \cos 2\theta_k \sum_{k'} V_{kk'} \sin 2\theta_{k'} = 0 \quad (\text{A.30})$$

y entonces

$$\xi_k \tan 2\theta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \sin 2\theta_{k'}. \quad (\text{A.31})$$

Definiendo ahora

$$\Delta_k \equiv \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \sin 2\theta_{k'} \quad (\text{A.32})$$

y

$$E_k \equiv (\Delta_k^2 + \xi_k^2)^{1/2}, \quad (\text{A.33})$$

donde  $E_k$  es la energía de excitación de una cuasipartícula con momento  $\hbar\mathbf{k}$  mientras que  $\Delta_k$  es la energía de excitación mínima, brecha de energía o gap superconductor.

Con estas dos definiciones de (A.31) se tiene que

$$\tan 2\theta_k = \frac{\Delta_k}{\xi_k}, \quad (\text{A.34})$$

entonces

$$2u_kv_k = \text{sen}2\theta_k = \frac{\Delta_k}{E_k} \quad (\text{A.35})$$

y

$$v_k^2 - u_k^2 = \text{cos}2\theta_k = \frac{\xi_k}{E_k} \quad (\text{A.36})$$

sustituyendo (A.35) en (A.32) para evaluar  $\Delta_k$

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} \frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}} V_{kk'} = \frac{1}{2} \sum_{k'} \frac{\Delta_{k'}}{(\Delta_{k'}^2 + \xi_{k'}^2)^{1/2}} V_{kk'}. \quad (\text{A.37})$$

La ecuación anterior la podemos escribir en forma integral utilizando la sustitución (2.44) obteniéndose

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} N(E_{k'}) \frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}} V_{kk'} dE_{k'} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} N(E_{k'}) \frac{\Delta_{k'}}{(\Delta_{k'}^2 + \xi_{k'}^2)^{1/2}} V_{kk'} dE_{k'}. \quad (\text{A.38})$$

Usando el modelo propuesto por Cooper y posteriormente por BCS de la ecuación (A.15) en la ecuación (A.38) así como la aproximación de que  $N(E_{k'})$  es una constante que tomaremos igual a la densidad de estados al nivel de Fermi para una dirección de espín  $N(E_F)$  entonces la brecha ya no depende de  $k$ , sino únicamente de la energía  $E$  por lo que se satisface que

$$\Delta_k = \begin{cases} \Delta & \text{si } |\xi_k| < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{si } |\xi_k| > \hbar\omega_D \end{cases} \quad (\text{A.39})$$

ya que  $\Delta$  es independiente de  $\mathbf{k}$  la ecuación (A.38) queda de la siguiente forma

$$\frac{1}{N(E_F)V} = \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{2(\Delta^2 + \xi^2)^{1/2}} = \text{senh}^{-1}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta}\right) \quad (\text{A.40})$$

entonces

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D}{\text{senh}^{-1}\left(\frac{1}{N(E_F)V}\right)} \approx 2\hbar\omega_D e^{-1/N(E_F)V} \quad (\text{A.41})$$

El último paso se justifica en el acoplamiento débil cuando  $N(E_F)V \ll 1$

Usando la ecuación (A.41) y la condición de normalización se obtiene trivialmente que

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right) \text{ y } u_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right) \quad (\text{A.42})$$

## A.1. Energía de condensación

Con el fin de mostrar que la energía del estado superconductor es menor que la energía del estado normal calculamos la energía de condensación  $\varepsilon_c$  definida como la diferencia entre dichas energías. Si en determinadas condiciones, ésta es negativa, entonces, en el estado superconductor, el sistema tendrá menor energía y éste será el estado base.

De la ecuación (A.27) se tiene que

$$\langle E \rangle_s = 2 \sum_k \xi_k v_k^2 - \sum_{k,k'} u_k v_k u_{k'} v_{k'} V_{kk'}, \quad (\text{A.43})$$

usando las ecuaciones (A.32) y (A.42)

$$\langle E \rangle_s = \sum_k \left( \xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k} \right) - \frac{\Delta^2}{V}. \quad (\text{A.44})$$

La energía del estado normal  $\langle E \rangle_n$  a  $T = 0$  al estado BCS con  $\Delta = 0$ , en este caso  $E_k = |\xi_k|$ . Entonces

$$\langle E \rangle_n = \sum_{k < k_F} 2\xi_k, \quad (\text{A.45})$$

los términos para  $|k| > k_F$  desaparecen ya que  $E_k = \xi_k$ . Por lo tanto

$$\langle E \rangle_s - \langle E \rangle_n = \sum_{k > k_F} \left( \xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k} \right) + \sum_{k < k_F} \left( -\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k} \right) - \frac{\Delta^2}{V}$$

$$= 2 \sum_{k > k_F} \left( \xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k} \right) - \frac{\Delta^2}{V}, \quad (\text{A.46})$$

lo anterior debido a la simetría alrededor de la energía de Fermi. En esta fórmula la suma expresa el cambio en la energía cinética mientras que el término  $-\frac{\Delta^2}{V}$  es el cambio en la energía potencial.

Cambiando la ecuación anterior a una integral sobre  $\xi_k$  desde 0 hasta  $\hbar\omega_D$

$$\langle E \rangle_s - \langle E \rangle_n = 2N(E_F) \left[ \int_0^{\hbar\omega_D} \xi_k d\xi_k - \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\xi_k^2}{(\Delta_k^2 + \xi_k^2)^{1/2}} d\xi_k \right]. \quad (\text{A.47})$$

Usando que  $\int \frac{x^2}{(1+x^2)^{1/2}} dx = \frac{1}{2} [x(1+x^2)^{1/2} - \sinh^{-1}x]$  y la expresión (A.41) para  $\Delta$  se obtiene que

$$\langle E \rangle_s - \langle E \rangle_n = \left[ \frac{\Delta^2}{V} - \frac{1}{2}N(E_F)\Delta^2 \right] - \frac{\Delta^2}{V}. \quad (\text{A.48})$$

Introduciendo el símbolo termodinámico  $U(T)$  para la energía interna del sistema se tiene que

$$\varepsilon_c = U_s(0) - U_n(0) = -\frac{1}{2}N(E_F)\Delta^2 \quad (\text{A.49})$$

ésta es la energía de condensación a  $T = 0$ , claramente es negativa, lo cual implica que el estado superconductor tiene una energía más pequeña que la del estado normal, es decir, el estado superconductor es el estado base.

## A.2. Solución del gap de BCS mediante una transformación canónica

Otra forma de encontrar la energía del estado base superconductor es mediante un proceso de diagonalización del Hamiltoniano BCS usando una transformación canónica (que no cambia los valores propios de la energía de los estados del sistema), yéndonos

a un espacio donde los operadores son de creación y aniquilación de cuasipartículas y no de electrones. Esta transformación se conoce con el nombre de Balatin-Bogoliubov [36, 37]. El punto de partida es asumir un condensado de partículas que tienen momento cero, es decir, tomaremos los pares de partículas con momentos y espines opuestos. Por simplicidad trabajaremos con las definiciones  $k \equiv k \uparrow$  y  $-k \equiv -k \downarrow$ .

Los operadores de la transformación canónica con la que se diagonaliza el hamiltoniano BCS son:

$$\gamma_k = u_k c_k - v_k c_{-k}^\dagger, \quad (\text{A.50})$$

$$\gamma_{-k} = u_k c_{-k} + v_k c_k^\dagger, \quad (\text{A.51})$$

y sus conjugados:

$$\gamma_k^\dagger = u_k c_k^\dagger - v_k c_{-k}, \quad (\text{A.52})$$

$$\gamma_{-k}^\dagger = u_k c_{-k}^\dagger + v_k c_k, \quad (\text{A.53})$$

donde  $u_k$  y  $v_k$  son funciones reales simétricas respecto a la transformación  $k \rightarrow -k$ . Asimismo, como la transformación canónica tiene que ser unitaria  $u_k^2 + v_k^2 = 1$ .

Estos operadores satisfacen las relaciones ordinarias para los operadores de Fermi

$$\{\gamma_k, \gamma_{k'}\} = \{\gamma_k, \gamma_{-k'}\} = \{\gamma_k^\dagger, \gamma_{-k'}\} = 0, \quad (\text{A.54})$$

$$\{\gamma_k^\dagger, \gamma_{k'}\} = \{\gamma_{-k}^\dagger, \gamma_{-k'}\} = \delta_{kk'}, \quad (\text{A.55})$$

$$m_k = \gamma_k^\dagger \gamma_k \quad y \quad m_{-k} = \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k}. \quad (\text{A.56})$$

Para obtener  $c_k$  en términos de gamas, multiplicamos la ecuación (A.50) por  $u_k$  y la ecuación (A.53) por  $v_k$ , de donde obtenemos  $u_k \gamma_k = u_k^2 c_k - u_k v_k c_{-k}^\dagger$  y  $v_k \gamma_{-k} = u_k v_k c_{-k} + v_k^2 c_k^\dagger$ . Sumando estas dos ecuaciones

$$c_k = u_k \gamma_k + v_k \gamma_{-k}^\dagger. \quad (\text{A.57})$$

Análogamente para los otros operadores

$$c_k^\dagger = v_k \gamma_{-k} + u_k \gamma_k^\dagger, \quad (\text{A.58})$$

$$c_{-k} = u_k \gamma_{-k} - v_k \gamma_k^\dagger, \quad (\text{A.59})$$

$$c_{-k}^\dagger = u_k \gamma_{-k}^\dagger - v_k \gamma_k. \quad (\text{A.60})$$

Utilizando estas definiciones reescribiremos el Hamiltoniano del sistema en términos de los operadores de cuasipartículas de Valatin-Bogoliubov.

El término de energía cinética de la ecuación (A.7)

$$H_T = \sum_{k,\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} = \sum_k \xi_k (c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k}) \quad (\text{A.61})$$

se obtiene transformando el producto  $c_k^\dagger c_k$  como

$$\begin{aligned} c_k^\dagger c_k &= (u_k \gamma_k^\dagger + v_k \gamma_{-k})(u_k \gamma_k + v_k \gamma_{-k}^\dagger) \\ &= u_k^2 \gamma_k^\dagger \gamma_k + u_k v_k \gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger + v_k u_k \gamma_{-k} \gamma_k + v_k^2 \gamma_{-k} \gamma_{-k}^\dagger, \end{aligned} \quad (\text{A.62})$$

y el producto  $c_{-k}^\dagger c_{-k}$  como

$$\begin{aligned} c_{-k}^\dagger c_{-k} &= (u_k \gamma_{-k}^\dagger - v_k \gamma_k)(u_k \gamma_{-k} - v_k \gamma_k^\dagger) \\ &= u_k^2 \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k} - u_k v_k \gamma_{-k}^\dagger \gamma_k^\dagger - v_k u_k \gamma_k \gamma_{-k} + v_k^2 \gamma_k \gamma_k^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{A.63})$$

Así pues, la energía cinética será

$$\begin{aligned} H_T &= \sum_k \xi_k [u_k^2 \gamma_k^\dagger \gamma_k + v_k^2 \gamma_{-k} \gamma_{-k}^\dagger + u_k v_k (\gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger + \gamma_{-k} \gamma_k) \\ &\quad + v_k^2 \gamma_k \gamma_k^\dagger + u_k^2 \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k} - u_k v_k (\gamma_{-k}^\dagger \gamma_k^\dagger + \gamma_k \gamma_{-k})]. \end{aligned} \quad (\text{A.64})$$

Usando las reglas de conmutación para las  $\gamma$ 's se tiene que

$$\gamma_{-k} \gamma_k = -\gamma_k \gamma_{-k} \quad \text{y} \quad \gamma_{-k}^\dagger \gamma_k^\dagger = -\gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger, \quad (\text{A.65})$$

por lo tanto

$$u_k v_k (\gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger + \gamma_{-k} \gamma_k) - u_k v_k (\gamma_{-k}^\dagger \gamma_k^\dagger + \gamma_k \gamma_{-k}) = 2u_k v_k (\gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger + \gamma_{-k} \gamma_k) \quad (\text{A.66})$$

y el término de energía cinética con coeficientes cuadráticos

$$\begin{aligned}
& u_k^2 \gamma_k^\dagger \gamma_k + v_k^2 \gamma_{-k} \gamma_{-k}^\dagger + v_k^2 \gamma_k \gamma_k^\dagger + u_k^2 \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k} \\
&= u_k^2 m_k + v_k^2 (1 - \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k}) + v_k^2 (1 - \gamma_k^\dagger \gamma_k) + u_k^2 m_{-k} \\
&= u_k^2 m_k + u_k^2 m_{-k} + v_k^2 (1 - m_{-k}) + v_k^2 (1 - m_k) \\
&= 2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)(m_k + m_{-k}). \tag{A.67}
\end{aligned}$$

Con las expresiones anteriores obtenemos finalmente que

$$H_T = \sum_k \xi_k \left[ 2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)(m_k + m_{-k}) + 2u_k v_k (\gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger + \gamma_{-k} \gamma_k) \right]. \tag{A.68}$$

Por otro lado, para el término de la energía potencial

$$H_V = - \sum_{k,k'} V_{kk'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \tag{A.69}$$

transformaremos primeramente

$$\begin{aligned}
c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} &= (u_k \gamma_k + v_k \gamma_{-k}^\dagger)(u_k \gamma_{-k} - v_k \gamma_k^\dagger) \\
&= u_k^2 \gamma_k \gamma_{-k} - u_k v_k \gamma_k \gamma_k^\dagger + v_k u_k \gamma_{-k}^\dagger \gamma_{-k} - v_k^2 \gamma_{-k}^\dagger \gamma_k^\dagger \\
&= [u_k v_k (1 - m_{-k} - m_k) + u_k^2 \gamma_k \gamma_{-k} - v_k^2 \gamma_{-k}^\dagger \gamma_k^\dagger] \tag{A.70}
\end{aligned}$$

y después

$$c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger = (u_{k'} \gamma_{k'}^\dagger + v_{k'} \gamma_{-k'}) (u_{k'} \gamma_{-k'}^\dagger - v_{k'} \gamma_{k'})$$

$$\begin{aligned}
&= u_{k'}^2 \gamma_{k'}^\dagger \gamma_{-k'}^\dagger - u_{k'} v_{k'} \gamma_{k'}^\dagger \gamma_{k'} + v_{k'} u_{k'} \gamma_{-k'} \gamma_{-k'}^\dagger - v_{k'}^2 \gamma_{-k'} \gamma_{k'} \\
&= u_{k'} v_{k'} (1 - m_{-k'} - m_{k'}) + u_{k'}^2 \gamma_{k'}^\dagger \gamma_{-k'}^\dagger - v_{k'}^2 \gamma_{-k'} \gamma_{k'} \tag{A.71}
\end{aligned}$$

con lo que obtenemos

$$\begin{aligned}
H_V &= - \sum_{k,k'} V_{kk'} [u_{k'} v_{k'} u_k v_k (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (1 - m_k - m_{-k})] \\
&\quad + u_{k'} v_{k'} (1 - m_{-k'} - m_{k'}) (u_k^2 - v_k^2) (\gamma_{-k} \gamma_k + \gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger) \\
&\quad + (\text{términos que son el producto de 4 operadores } \gamma) \tag{A.72}
\end{aligned}$$

Utilizando las expresiones (A.68) y (A.72) el hamiltoniano se puede escribir como

$$H_R = E_0 + H_0 + H_1, \tag{A.73}$$

donde

$$E_0 = \sum_k \xi_k 2v_k^2 - \sum_{k,k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} u_k v_k, \tag{A.74}$$

donde  $E_0$  es un término constante independiente de los operadores de Fermi y corresponde a la energía del estado fundamental que en la ecuación (A.28) se denota como  $E'$ .

Imponiendo la condición  $\frac{\partial E_0}{\partial v_k} = 0$  se llega a la relación

$$2\xi_k u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} = 0, \tag{A.75}$$

que es equivalente a la relación (A.30) una vez que se ha hecho el cambio de variable  $u_k = \cos\theta_k$ ,  $v_k = \sin\theta_k$ .

El término

$$H_0 = \sum_k \xi_k (u_k^2 - v_k^2) (m_k + m_{-k})$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{k,k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} u_k v_k (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (m_k + m_{-k}) \\
& + \sum_{k,k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} u_k v_k (m_{k'} + m_{-k'})
\end{aligned} \tag{A.76}$$

es la parte diagonal del hamiltoniano ya que sólo depende de operadores  $m$ .

$$\begin{aligned}
H_1 = \sum_k \left[ 2\xi_k u_k v_k - \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} (1 - m_{k'} - m_{-k'}) (u_k^2 - v_k^2) \right] \\
\times (\gamma_{-k} \gamma_k + \gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger),
\end{aligned} \tag{A.77}$$

es la parte no diagonal de hamiltoniano que contiene el producto de dos operadores de Fermi. Obsérvese que la condición (A.75) anula a  $H_1$ .

Es importante señalar que la función de onda del estado base superconductor  $|\psi_{BCS}\rangle$  es una eigenfunción del hamiltoniano diagonalizado, con  $m_{k'} = m_{-k'} = 0$  para todo  $k$ , es decir, está definida como el estado vacío de los operadores  $\gamma$ . Por lo tanto

$$\gamma_k |\psi_{BCS}\rangle = \gamma_{-k} |\psi_{BCS}\rangle = 0. \tag{A.78}$$

Lo cual se puede verificar de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
\gamma_k |\psi_{BCS}\rangle &= (u_k c_k - v_k c_{-k}^\dagger) (u_k + v_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) \prod_{q \neq k} (u_q + v_q c_q^\dagger c_{-q}^\dagger) |0\rangle \\
&= (u_k^2 c_k + u_k v_k c_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger - v_k u_k c_{-k}^\dagger - v_k^2 c_{-k}^\dagger c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) \prod_{q \neq k} (u_q + v_q c_q^\dagger c_{-q}^\dagger) |0\rangle.
\end{aligned}$$

Utilizando las reglas de conmutación para las  $\gamma$  se encuentra que los dos términos de en medio en el paréntesis de la segunda línea se anulan mutuamente y el primero y el último término dan cero al operar sobre el vacío. Por lo tanto

$$\gamma_k |\psi_{BCS}\rangle = 0.$$

La ecuación  $\gamma_{-k} |\psi_{BCS}\rangle = 0$  se demuestra de la misma forma.

Para el caso de los estados excitados tenemos que

$$\begin{aligned}
\gamma_k^\dagger |\psi_{BCS}\rangle &= (u_k c_k^\dagger - v_k c_{-k})(u_k + v_k c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) \prod_{q \neq k} (u_q + v_q c_q^\dagger c_{-q}^\dagger) |0\rangle \\
&= (u_k^2 c_k^\dagger + u_k v_k c_k^\dagger c_k^\dagger c_{-k}^\dagger - v_k u_k c_{-k} - v_k^2 c_{-k} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger) \prod_{q \neq k} (u_q + v_q c_q^\dagger c_{-q}^\dagger) |0\rangle \\
&= c_k^\dagger \prod_{q \neq k} (u_q + v_q c_q^\dagger c_{-q}^\dagger) |0\rangle \equiv |\psi_{k\uparrow}\rangle, \tag{A.79}
\end{aligned}$$

similarmemente se puede obtener

$$\gamma_{-k}^\dagger |\psi_{BCS}\rangle = c_{-k}^\dagger \prod_{q \neq k} (u_q + v_q c_q^\dagger c_{-q}^\dagger) |0\rangle \equiv |\psi_{-k\downarrow}\rangle. \tag{A.80}$$

Las excitaciones son, entonces, cuasipartículas, es decir, partículas con su entorno modificado, capaces de formar pares de Cooper.  $\gamma_k^\dagger$  crea bogolones de momento  $k$  y espín  $\uparrow$  y  $\gamma_{-k}^\dagger$  crea bogolones de momento  $-k$  y espín  $\downarrow$ . Sus operadores de número son  $m_k$  y  $m_{-k}$ .

En la obtención del gap a  $T = 0$  se considera que  $m_{k'} = m_{-k'} = 0$  (no hay excitaciones) por lo que la contribución de  $H_0$  es idénticamente cero.

## Apéndice B

# La brecha a temperatura finita

De acuerdo a la transformación canónica usada en la sección anterior para diagonalizar  $H_R$ , se establecieron condiciones para  $u_k$  y  $v_k$  de tal forma que los términos no diagonales de  $H_T$  y  $H_V$  se anulen. La ecuación que obtuvimos fue la (A.77), donde, para resolverla, pusimos  $m_{k'} = m_{-k'} = 0$  lo cual quiere decir que no había excitaciones ya que se trataba del estado base. A temperatura finita, habrá excitaciones y lo anterior ya no será cierto.

En un sistema de fermiones independientes a temperatura finita,  $T$ , el promedio de ocupación de cada estado está determinado por la distribución de Fermi-Dirac

Además, dado que las cuasipartículas no interactúan (en la aproximación de campo medio) entonces

$$\langle m_k \rangle = \langle m_{-k} \rangle = f(E_k), \quad (\text{B.1})$$

donde

$$f(E_k) = \frac{1}{e^{E_k/k_B T} + 1} \quad (\text{B.2})$$

De manera general la ecuación (A.77) se satisface si ponemos la expresión dentro del corchete grande igual a cero. Así se obtiene

$$2\xi_k u_k v_k - (u_k^2 - v_k^2) \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} [1 - 2f(E_{k'})] = 0. \quad (\text{B.3})$$

La única diferencia entre esta ecuación y la ecuación (A.75) es el factor  $[1 - 2f(E_{k'})]$ . Haciendo nuevamente  $u_k = \cos\theta_k$  y  $v_k = \sin\theta_k$  tendremos que la expresión (B.3) toma la forma

$$2\xi_k \sin 2\theta_k - \cos 2\theta_k \sum_{k'} V_{kk'} \sin 2\theta_{k'} [1 - 2f(E_{k'})] = 0. \quad (\text{B.4})$$

Definiendo ahora

$$\Delta_k(T) \equiv \sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} [1 - 2f(E_{k'})] = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \sin 2\theta_{k'} [1 - 2f(E_{k'})] \quad (\text{B.5})$$

y

$$E_k \equiv (\Delta_k^2(T) + \xi_k^2)^{1/2}, \quad (\text{B.6})$$

obtenemos de manera análoga a (A.37) que

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} \frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}} V_{kk'} [1 - 2f(E_{k'})] = \frac{1}{2} \sum_{k'} \frac{\Delta_{k'}}{(\Delta_{k'}^2 + \xi_{k'}^2)^{1/2}} V_{kk'} [1 - 2f(E_{k'})]. \quad (\text{B.7})$$

Por otra parte

$$\begin{aligned} 1 - 2f(E_{k'}) &= 1 - \frac{2}{e^{E_{k'}/k_B T} + 1} = \frac{e^{E_{k'}/k_B T} - 1}{e^{E_{k'}/k_B T} + 1} \\ &= \tanh(E_{k'}/k_B T) = \tanh \frac{(\Delta_{k'}^2 + \xi_{k'}^2)^{1/2}}{2k_B T} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

con lo cual obtenemos

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{(\Delta_{k'}^2 + \xi_{k'}^2)^{1/2}} \tanh \frac{(\Delta_{k'}^2 + \xi_{k'}^2)^{1/2}}{2k_B T}. \quad (\text{B.9})$$

De acuerdo al modelo BCS

$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \begin{cases} -V & \text{si } \xi_k < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

y

$$\Delta_k(T) = \begin{cases} \Delta(T) & \text{si } |\xi_k| < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{otro caso} \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

por lo tanto la ecuación para  $\Delta_k$  será

$$VN(E_F) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\tanh\left\{\frac{[\xi^2 + \Delta^2(T)]^{\frac{1}{2}}}{2k_B T}\right\}}{[\xi^2 + \Delta^2(T)]^{\frac{1}{2}}} d\xi = 1. \quad (\text{B.12})$$

En esta ecuación se realizó el cambio de sumatoria a integral y se tomó en cuenta la simetría de  $\xi$  alrededor del nivel de Fermi.

Para  $T = 0$  esta ecuación se reduce a la que obtuvimos previamente en la ecuación (A.41). Cuando aumentamos la temperatura por arriba de cero, el numerador del integrando se hace más pequeño, por lo tanto, para que la ecuación anterior se cumpla, el denominador también deberá disminuir. Esto implica que  $\Delta$  decrece monótonamente como función de  $T$ .

El decremento inicial es exponencialmente lento, hasta que  $k_B T$  es del orden de  $\Delta(0)$  y la excitación de las cuasipartículas es importante; en este momento  $\Delta(T)$  comienza a caer más rápidamente hasta que en  $T = T_c$  desaparece.

## B.1. La temperatura crítica

El valor de la temperatura crítica del modelo BCS se obtiene a partir de la ecuación para la brecha (B.12) al considerar el caso cuando  $\Delta(T_c) = 0$ . Realizando el cambio de variables sin dimensiones obtenemos

$$VN(E_F) \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}} x^{-1} \tanh x \, dx = 1 \quad (\text{B.13})$$

o bien

$$[\ln x \tanh x] \Big|_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}} - \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}} \text{sech}^2 x \ln x \, dx = \frac{1}{VN(E_F)}. \quad (\text{B.14})$$

Para el caso de superconductores con acoplamiento débil ( $\hbar\omega_D \gg k_B T_c$ ) podemos reemplazar la  $\tanh(\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c})$  por la integral y extender el límite superior de la integral hasta el infinito, de esta forma se tiene

$$\ln\left(\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}\right) - \int_0^\infty \operatorname{sech}^2 x \ln x \, dx = \frac{1}{VN(E_F)} \quad (\text{B.15})$$

El valor de la integral de la ecuación anterior es  $\ln(0.44)^{-1}$ , de donde se obtiene:

$$\ln\left(\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}\right) + \ln(0.44)^{-1} = \frac{1}{VN(E_F)} \quad (\text{B.16})$$

entonces

$$\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c} (0.44)^{-1} = \exp\left\{\frac{1}{VN(E_F)}\right\}, \quad (\text{B.17})$$

por lo que

$$k_B T_c = 1.14 \hbar\omega_D \exp\left\{-\frac{1}{VN(E_F)}\right\}. \quad (\text{B.18})$$

Al comparar esta ecuación con el resultado que obtuvimos para la brecha a  $T = 0$  (A.41) se cumple que

$$k_B T_c = 1.14 \frac{\Delta}{2} = 0.565 \Delta \quad (\text{B.19})$$

por lo tanto

$$\frac{2\Delta}{k_B T_c} = 3.53. \quad (\text{B.20})$$

Esta es una de las llamadas Relaciones Universales de BCS.

# Bibliografía

- [1] P. Salas, M. Fortes, M. A. Solís, F. Sevilla, *Physica C* **524**, 37-43 (2016).
- [2] R. Mendoza, M. Fortes, M. de Llano, M. A. Solís, *Physica C* **471**, 497-503 (2011).
- [3] S. K. Adhikari, M. Casas, A. Puente, A. Rigo, M. Fortes, M. A. Solís, M. de Llano, A. A. Valladares, O. Rojo, *Physica C* **351**, 341-348 (2001).
- [4] H. K. Onnes, *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden*, **119**, **120**, **122** (1911).
- [5] W. Meissner & R. Ochsenfeld, *Naturwiss* **21**, 787 (1933).
- [6] A. Lozzane *Rev. Mex. Fís.* **45** 517-522 (1999).
- [7] F. London and H. London, *Physica* **2**, 341 (1935).
- [8] R. Baquero, O. Navarro, *Ideas fundamentales de la superconductividad*, (UNAM, 2007)
- [9] V. L. Ginzburg & L. D. Landau, *J. Exp. Theoret. Phys.(U.S.S.R.)* **20** , 1064 (1950).
- [10] L. N. Cooper, *Phys. Rev.* **104**, 1189 (1956).
- [11] J. Bardeen, L. N. Cooper & J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [12] J. G. Bednorz & K. A. Müller, *Z. Phys.* **64**, 189 (1968).
- [13] <http://www.superconductors.org>
- [14] G. Wu, et al. *J. Phys. Condens. Matter* **21**, 142203 (2009).
- [15] Drozdov A.P., Eremets M.I., Troyan I.A., Ksenofontov V., Shylin S.I., *Nature* **525**, 73 (2015).
- [16] Ion Errea, Matteo Calandra, Chris J. Pickard, Joseph Nelson, Richard J. Needs, Yinwei Li, Hanyu Liu, Yunwei Zhang, Yanming Ma, and Francesco Mauri, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 157004 (2015).

- [17] <http://www.wou.edu/~rmiller09/superconductivity/>
- [18] I. Bosovic, C. Ahn, *Nature Physics* **10**, 892–895 (2014).
- [19] R. A. Barrio, C. Wang, J . Tagüeña & J . Keller, *Rev. Mex. Fís.* **34**, 407 (1987).
- [20] M. L. Kubic, *Phys. Rep.* **338**, 1-264 (2000)
- [21] J. Leggett, *Nature physics* **2**, 134-136 (2006).
- [22] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, (Pergamon Press, New York, 1985)
- [23] K. Huang, *Statistical Mechanics*, 2a. Ed. (Weley Text Books, New York, 1987).
- [24] N. Ashcroft y D. Mermin, *Solid State Physics*, (HRW International Editions, New York, 1976.)
- [25] M. Thinkham, *Introduction to Superconductivity*, 2a. Ed. (McGrawHill, New York, 1996)
- [26] S. Fujita, S. Godoy, *Quantum Statistical Theory of Superconductivity*, (Kluwer Academic Publishers, New York, 2002)
- [27] C. Kittel, *Introducción a la Física del Estado Sólido*, 3a. Ed. (Reverté, España, 1997)
- [28] <https://thiscondensedlife.wordpress.com/2015/10/27/a-critical-ingredient-of-cooper-pairing-in-superconductors/>
- [29] R. de L. Kronig, W. G. Penney, *Procc. R. Soc.* **A 130**, 499 (1931).
- [30] F. Bloch. *Z. Phys.* **52**. 555-600 (1928).
- [31] F. Sevilla, *Modelos Bosón-Fermión de la superconductividad* (Tesis de Doctorado), UNAM (2004)
- [32] A. Nieves, F. Domínguez, *Métodos numéricos aplicados a la ingeniería*, (Patria, México, 2014)
- [33] G. Dahquist, A. Björck, *Numerical Methods*, (Dover Publications Inc. New York, 2003)
- [34] P. Salas, F. J. Sevilla, M. Fortes, M. de Llano, A. Camacho, and M. A. Solís, *Phys. Rev. A* **82**, 033632 (2010).
- [35] C. P. Poole, *Handbook of superconductivity*, (Academic Press, San Diego, 1999)
- [36] N. N. Bogoliubov, *Nuovo Cimento* **7**, 794 (1958)
- [37] J. G. Valatin, *Nuovo Cimento* **7**, 843 (1958).