

00388



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO

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

"SUPERCONDUCTIVIDAD CON ESPIN TRIPLETE EN EL  
MODELO DE HUBBARD"

**T E S I S**  
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE  
DOCTOR EN CIENCIA E INGENIERIA DE  
M A T E R I A L E S  
P R E S E N T A  
JOSE SAMUEL MILLAN MALO

DIRECTOR DE TESIS DR. CHUMIN WANG CHEN



MEXICO, D. F.

2005

m341745



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

*“Mostraremos verdadera sabiduría si logramos  
permanecer en amistad con Dios”*

## *Agradecimientos*

*En primer lugar quiero agradecer con un cariño especial a mi madre Ana María el apoyo y aliento que me ha brindado durante estos años de mi estancia doctoral, sobre todo por esa frase que frecuentemente me repite: "Yo se que tu puedes".*

*Así mismo a mi padre Carlos por permitir la voluntad de mi mamá de permanecer en la casa de San Jerónimo durante la duración de mis estudios doctorales y sobre todo por darme esa inspiración intelectual en el arte de aprender.*

*A mi esposa Lupita y a mis hijos Elizabeth, Luz, Benjamín, Samuel, Carlos, Jorge, Lupita y Rosita por su amor que compartieron conmigo durante este trabajo arduo de 4 años.*

*A mis hermanos Ana María, Carlos, Paty, Alberto, Bety, Gemma y Gaby por su interés en el éxito de mis estudios doctorales.*

*A Socorro y a mis cuñados Luis, Antonio, Jaime y Cristóbal por sus buenos deseos para mi superación profesional.*

*Al Ing. José Luis Orta Acuña quien confió en mi como un candidato para obtener el grado doctoral.*

*Al personal académico y administrativo de la UNACAR principalmente a Nicolás Novelo Nobles, rector de la Universidad.*

*Al personal de la secretaría académica de la UNACAR, la Lic. Eunice Rivero y al Mtro. Andrés E. Salazar Dzib por su constante apoyo e interés en el buen desarrollo de mis estudios doctorales.*

*Al Dr. Chumin Wang Chen por su paciencia y empuje para realizar la investigación de mi tesis doctoral en un excelente nivel académico.*

*Al Dr. Luis Pérez López, quien fungió como un segundo asesor, por compartir conmigo sus experiencias y conocimientos científicos durante los cuatro años de mi estancia doctoral.*

*A los doctores Tatsuo Akachi Miyazaki y José Guadalupe Pérez Ramírez por formar parte mi comité tutorial y por su interés en el buen desempeño de mi preparación académica.*

*A todos los compañeros de trabajo, Vicenta, Rocío, Fernando, Yuri, Alejandro y Rodolfo, por sus buenos consejos y sobre todo por mantener un ambiente de trabajo optimista, el cual es favorable en el buen desarrollo de nuestros respectivos trabajos.*

*A nuestra secretaria Marcela por la ayuda en los llenados de los reportes escolares y al personal de apoyo técnico Cain y Cesar por mantener en buen funcionamiento y en óptimas condiciones los equipos de cómputo.*

*Agradezco de forma muy especial al CONACYT por los 6 años de apoyo económico para lograr culminar mis estudios doctorales.*

*Así mismo a PROMEP por el apoyo económico de 3 años y espero que la culminación de mis estudios sea de satisfacción para todo el personal de la SEP que realiza los trámites escolares de los estudiantes.*

*Al instituto de Supercómputo de la UNAM por mantener en excelente estado la computadora Bakliz que fue una de las principales herramientas de trabajo en la realización de esta tesis doctoral.*

*Por último quiero agradecer en general a todo el personal del Instituto de Investigaciones en Materiales por darme la oportunidad de estudiar un tema tan importante e interesante en la ciencia de los materiales y permitirme poner mi granito de arena en la constante evolución del conocimiento científico.*

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.

NOMBRE: José Samuel Millán Malo  
FECHA: 3 - marzo - 05  
FIRMA: Millán

## Resumen

El fenómeno de la superconductividad fue descubierto en 1911 por K. Onnes, mientras que la teoría microscópica que explica dicho fenómeno fue establecida hasta el año de 1957 por J. Bardeen, L.N. Cooper y J.R. Schrieffer (BCS). Sin embargo, en esta teoría se excluye el apareamiento con espín uno ó triplete, ya que en general estos pares tienen una energía de amarre menor que la de los pares con espín cero o singulete. Recientemente, se ha reportado superconductividad con espín triplete en el rutenato de estroncio ( $Sr_2RuO_4$ ) con una temperatura de transición ( $T_c$ ) de 1.5 K y presenta una estructura tipo perovskita similar a la del  $La_2CuO_4$ . Cabe mencionar que la formación de pares con espín triplete se observa en superfluidos de  $^3He$ , así como en fermiones pesados, por ejemplo  $UGe_2$ . En general, el apareamiento puede tener simetría  $s$  o  $d$  para el caso singulete y  $p$  o  $f$  para el caso triplete, ya que  $s$  y  $d$  tienen funciones de onda espaciales simétricas mientras que éstas son anti-simétricas para  $p$  y  $f$ . Entre los modelos que consideran la correlación electrónica en sólidos, el modelo de Hubbard tiene la virtud de ser simple y general, independientemente del origen de la correlación. En particular, hemos encontrado que el modelo de Hubbard generalizado que incluye la interacción de carga-enlace (salto correlacionado) conduce a la formación de pares con espín singulete y triplete, por lo que dentro de dicho modelo hemos estudiado el estado superconductor con diferentes simetrías. Hoy en día, la mayoría de los especialistas del campo cree que los pares de Cooper se localizan principalmente en los planos de  $CuO_2$  de los superconductores de alta  $T_c$  y en los planos de  $RuO_2$  para el caso del  $Sr_2RuO_4$ . Estos planos tienen simetría de una red cuadrada -o pequeña perturbación de la misma-, en la cual los estados con simetría  $p$  están doblemente degenerados y una pequeña distorsión en los ángulos rectos de la red induce un desdoblamiento de estos niveles de energía, por lo que para ciertos casos, tal distorsión podría llevarnos a un estado base con simetría  $p$  en lugar de  $s$  ó  $d$ . En otras palabras, este desdoblamiento podría lograrse a través de una deformación infinitesimal de la red cuadrada, debido a que ahora, la probabilidad del salto correlacionado a segundos vecinos depende de la dirección  $\mathbf{x} + \mathbf{y}$  ó  $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ . Para el caso de dos partículas, hemos partido del método del espacio de estados que permite encontrar soluciones exactas del hamiltoniano. Los resultados muestran que para el caso de electrones el apareamiento con simetría  $p$  se obtiene mediante una distorsión infinitesimal, mientras que para dos huecos se requiere un valor mínimo de la misma. Para una densidad finita de electrones y siguiendo el formalismo BCS, obtenemos un sistema de ecuaciones integrales acopladas para la brecha superconductora  $[\Delta(\mathbf{k})]$  y el potencial químico ( $\mu$ ). Dicho sistema de ecuaciones se

resuelve generalmente en forma numérica y es altamente demandante en el tiempo de cómputo, debido a las integrales múltiples en el espacio recíproco así como la búsqueda de soluciones en dos o tres dimensiones. Para ello, hemos desarrollado un nuevo método que consiste en estimar  $\mu$  a partir de la densidad de estados de una partícula obtenida dentro de la aproximación de campo medio. Los resultados numéricos obtenidos con este método muestran una excelente concordancia con los cálculos derivados de las ecuaciones simultáneas. Dicho método nos ha permitido analizar la superconductividad con simetría  $p$ , cuya  $T_c$  se encuentra en el rango de los datos experimentales. Por otro lado, hemos encontrado la existencia de un valor óptimo ( $n_{op}$ ) de la densidad electrónica ( $n$ ) para la  $T_c$  máxima, hecho que puede deberse a que para bajas densidades de electrones la  $T_c$  crece con  $n$ , mientras que para alta  $n$  la interacción efectiva disminuye. Asimismo, hemos analizado la dependencia de la razón de la brecha energética con la temperatura, la cual muestra un comportamiento distinto al de la teoría BCS. Por último, hemos planteado la posibilidad de extender esta investigación hacia una descripción unificada de la superconductividad con simetrías  $s$ ,  $p$  y  $d$  dentro del modelo de Hubbard.

## Contenido

Introducción.....	5
1. Modelo de Hubbard.....	9
1.1 Formalismo de Segunda Cuantización.....	9
1.2 Hamiltoniano de Hubbard.....	10
1.3 Método de Mapeo.....	14
2. Formación de Pares.....	17
2.1 Pares con Espín Singulete y Triplete.....	17
2.2 Apareamiento en la Red Cuadrada.....	19
3. Estados Superconductores.....	26
3.1 Superconductividad a $T = 0$ .....	27
3.2 Descripción Unificada a $T \neq 0$ .....	30
3.3 Simetrías del Estado Superconductor.....	36
4. Superconductividad Triplete.....	44
4.1 Límite Fuertemente Correlacionado.....	44
4.2 Determinación del Potencial Químico.....	48
4.3 Superconductividad con simetría $p$ .....	50
Conclusiones.....	59



A. Transformación al Espacio Recíproco .....	61
B. Estados de Dos Partículas.....	73
C. Apareamiento en el Espacio Recíproco.....	77
D. Energía del Estado Triplete.....	85
Referencias .....	91

# Introducción

El fenómeno de la superconductividad se manifiesta macroscópicamente en dos propiedades: conductividad eléctrica infinita y diamagnetismo perfecto (en superconductores tipo I). En paralelo, se observa que no hay cambios estructurales durante la transición superconductor, por lo que se cree que el fenómeno es de origen electrónico. El experimento del efecto isotópico muestra que hay una participación fonónica importante en los superconductores tradicionales. En 1955, M. R. Schafroth demostró que un gas de bosones cargados, cuando pasa a una condensación de Bose-Einstein, explicaría muchas de las propiedades superconductoras conocidas en ese tiempo [Schafroth, 1955]. En 1956, L. N. Cooper propuso la posibilidad del apareamiento electrónico vía fonones [Cooper, 1956], así mismo, en 1957 J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer (BCS) extendieron esta idea y encontraron que la superconductividad se debe a un condensado de dichos pares [Bardeen, *et al.*, 1957]. Contrario a muchas propiedades electrónicas de los sólidos, las cuales pueden entenderse -al menos cualitativamente- en términos de modelos de partículas independientes, la superconductividad requiere teorías que incluyan la correlación electrónica más allá de un tratamiento perturbativo. En particular, la teoría BCS tiene dos simplificaciones importantes del problema de muchos cuerpos que son: (1) se emplea la técnica de campo medio para tratar el problema de muchos pares, (2) se supone que el potencial atractivo del apareamiento electrónico es independiente del estado electrónico, siempre y cuando su energía relativa a la de Fermi sea menor que la máxima energía fonónica. Cabe mencionar que la teoría BCS tiene buenas predicciones cualitativas del comportamiento de los superconductores con algunas excepciones, por ejemplo, los cerámicos superconductores tienen una temperatura crítica ( $T_c$ ) que no se explica fácilmente con el mecanismo de fonones, así como la simetría  $d_{x^2-y^2}$  [Wollman, *et al.*, 1993] de la brecha superconductor observada en la mayoría de los compuestos de alta  $T_c$ , los cuales pertenecen a los superconductores tipo II, es decir, tienen un estado intermedio en el cual el campo magnético externo penetra parcialmente al superconductor en cuantos de flujo magnético formando una red triangular para el caso ideal [Abrikosov, 1957].

Un modelo simple y general para abordar la correlación electrónica en sólidos es el de Hubbard [Hubbard, 1963], el cual podría conducir a una interacción electrónica no uniforme en el espacio recíproco y consecuentemente una brecha superconductor anisotrópica. Se ha demostrado que una pequeña participación del salto correlacionado de segundos vecinos en una red cuadrada podría conducir a superconductividad con simetría  $d$  [Pérez, *et al.*, 2002]. Así mismo, hemos encon-

trado en esta investigación que una distorsión infinitesimal de los ángulos rectos de la red cuadrada nos lleva a un estado superconductor con simetría  $p$ . En ambos casos, se ha partido de un hamiltoniano de Hubbard con una sola banda  $s$  en una red cuadrada, donde la función de onda del par con simetría  $d$  ( $p$ ) proviene de orbitales del tipo  $s$ , ya que en los planos de cobre-oxígeno (rutenio-oxígeno) de los cerámicos superconductores la dinámica de los electrones puede describirse adecuadamente considerando únicamente la banda con simetría  $s$  que cruza la energía de Fermi [Entel, *et al.*, 1990] [Mazin, *et al.*, 1997]. En primer término, abordaremos el problema del apareamiento electrónico aprovechando las simetrías del espacio de estados de dos partículas [Millán, *et al.*, 2004], las cuales nos permiten resolver el problema de manera simple y exacta [Navarro, *et al.*, 1992]. Así mismo, extenderemos el estudio a densidades finitas con el fin de analizar las propiedades termodinámicas de los superconductores con espín triplete [Millán, *et al.*, 2005a]. Cabe mencionar que para el  $Sr_2RuO_4$ , la prueba experimental del corrimiento de Knight sugiere una brecha superconductora con simetría  $p$  [Ishida, *et al.*, 1998]. más aún, se ha observado una distorsión estructural en la superficie del  $Sr_2RuO_4$  [Matzdorf, *et al.*, 2000], a pesar de que su ocurrencia en el interior del mismo es todavía tema de discusión.

En la literatura se ha comentado que la superconductividad con simetría  $p$  no puede presentarse en dos dimensiones dentro del modelo de Hubbard [Beenen, *et al.*, 1995], sin embargo, en este trabajo **reportamos por primera vez** que el modelo de Hubbard es compatible con el estado superconductor de simetría  $p$  inducido por una pequeña distorsión de los ángulos rectos de la red cuadrada [Millán, *et al.*, 2005a]. Por otra parte, hemos visto que es factible desarrollar una descripción unificada de la superconductividad con simetrías  $s^*$ ,  $p$  y  $d$ , donde la interacción relevante podría ser el salto correlacionado a segundos vecinos ( $\Delta t_3$ ).

Dentro del formalismo BCS generalizado -el potencial químico del estado superconductor ( $\mu$ ) no es constante-, la determinación del estado superconductor se reduce a la solución de las ecuaciones acopladas que contienen integrales múltiples en el espacio recíproco, donde las incógnitas son  $\mu$  y la brecha energética superconductora  $\Delta(\mathbf{k})$  o en su caso la temperatura crítica  $T_c$ . En general, estas ecuaciones no tienen soluciones analíticas, por lo que se emplea el método de autoconsistencia que consiste en proponer un valor inicial de la solución, el cual genera soluciones de subsecuentes generaciones a través de las ecuaciones hasta que cumpla un criterio de convergencia. A este respecto, otra contribución importante de esta investigación es la propuesta de un **nuevo método** para determinar  $\mu$ , partiendo de la densidad de estados de una partícula obtenida dentro de la aproximación de campo medio. Por ejemplo, para el caso de simetría  $p$  dicho método reduce un sistema de

dos ecuaciones simultáneas a una sola ecuación, sin perder precisión numérica, lo cual nos ha hecho posible analizar la superconductividad con  $T_c$  dentro del intervalo de los resultados experimentales, es decir, cercana al cero absoluto.

En lo referente a la estructura de esta tesis, se comienza con un pequeño repaso del lenguaje de segunda cuantización, el cual se utiliza ampliamente en la mecánica cuántica cuando se tiene un sistema de muchas partículas interactuantes. El modelo de Hubbard escrito en este lenguaje constituye quizás el modelo más sencillo y general para estudiar la correlación electrónica. En la última sección del primer capítulo se aborda el problema del apareamiento de dos partículas con espín triplete partiendo del método de espacio de estados [Navarro, *et al.*, 1993], el cual permite mapear el problema de  $n$  partículas en  $d$  dimensiones a un problema de amarre fuerte en un espacio de  $nd$  dimensiones. Aprovechando la simetría traslacional en el espacio de estados, el problema de apareamiento puede abordarse en un espacio proyectado en  $(n - 1)d$  dimensiones introduciendo un vector  $\mathbf{K}$  del centro de masa del par. En este nuevo espacio las interacciones electrónicas pueden visualizarse como impurezas -tanto en sitios como en enlaces- en la red de estados y los estados localizados en dichas impurezas corresponden precisamente los estados apareados con diferentes simetrías espaciales.

En el segundo capítulo se analizará la formación de pares con espín singulete y triplete, calculando la brecha energética de apareamiento, la longitud del par, así como el diagrama de fases. Dicho análisis se realiza tanto para el caso de electrones como para huecos, resultando más fuerte el apareamiento entre huecos cuando la simetría de la función de onda del par es del tipo  $d$ , mientras que el apareamiento es preferentemente entre electrones cuando la citada simetría es del tipo  $p$ .

En el tercer capítulo se desarrolla una extensión del formalismo BCS a potenciales de interacción dependientes de los estados electrónicos, así como a variaciones de  $\mu$  como función de  $n$  y  $T$ . Asimismo, se presenta un esquema vectorial unificado para la superconductividad con espín singulete y triplete, basado en el método de transformación canónica de Bogoliubov y Valantin para obtener finalmente un sistema de ecuaciones integrales, las cuales determinan simultáneamente  $\mu$  y  $\Delta(\mathbf{k})$  o en su caso  $T_c$ . Estas ecuaciones constituyen la base teórica para obtener los resultados presentados en el siguiente capítulo.

En el capítulo 4 se exponen las principales propiedades de la superconductividad con simetría  $p$ , comenzando con las soluciones analíticas en el límite diluido. Así mismo, los resultados del estado superconductor con simetría  $p$  muestran que la densidad electrónica óptima ( $n_{op}$ ) correspondiente a la máxima  $T_c$  se encuentra en la región de bajas densidades, a diferencia del estado superconductor con simetría  $d$  donde la  $n_{op}$  se encuentra cercana a la zona de banda casi llena. Adi-

cionalmente, hemos encontrado que la brecha superconductora con simetría  $p$  ( $\Delta_p$ ) muestra un comportamiento diferente de la brecha energética con la temperatura, en comparación con el estado superconductor con simetría  $s$ . El espectro de excitación de un estado superconductor con espín triplete muestra una simetría  $p$  en la región de una densidad electrónica ( $n$ ) menor que  $n_{op}$  y una simetría más compleja para  $n > n_{op}$ .

En los apéndices de esta tesis, se presentan los desarrollos analíticos de las fórmulas más importantes utilizadas a lo largo de la misma. En particular, el Apéndice A contiene el desarrollo de la transformación al espacio recíproco del hamiltoniano de Hubbard generalizado para una red cuadrada con distorsión. Con el fin de analizar el efecto de dicha distorsión, en el Apéndice B hemos desarrollado con detalle la solución del problema de dos partículas en una red cuadrada de 421 estados proyectados. Por otra parte, en el Apéndice C se presenta en detalle el proceso de obtención de la energía de apareamiento con espín singulete y triplete en el espacio recíproco. Finalmente, en el Apéndice D se muestra la deducción analítica del cálculo de la energía total, partiendo de una función de onda de  $N$  pares de electrones con espines paralelos.

Por último, en lo referente a la bibliografía, las citas se ordenan de acuerdo al apellido del primer autor y del año de la publicación.

# Capítulo 1

## Modelo de Hubbard

En este capítulo se presentan la técnica de segunda cuantización, el hamiltoniano de Hubbard y el método de mapeo en una red cuadrada para dos partículas con el mismo espín.

### 1.1 Formalismo de Segunda Cuantización

El lenguaje de segunda cuantización es el apropiado para describir sistemas de muchas partículas interactuantes y los operadores en este lenguaje incorporan la estadística de partículas cuánticas (bosones o fermiones). Para el caso de  $N$  fermiones, la función de onda debe ser antisimétrica bajo el intercambio de partículas, la cual puede escribirse como un producto antisimétrico de funciones de onda de una sola partícula, es decir, un determinante de Slater

$$\Phi(\xi_1, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\xi_1) \dots \phi_1(\xi_N) \\ \dots \\ \phi_N(\xi_1) \dots \phi_N(\xi_N) \end{vmatrix}, \quad (1)$$

donde  $\phi_l$  representa al  $l$ -ésimo estado cuántico de una sola partícula y  $\xi_i$  son las coordenadas de la  $i$ -ésima partícula incluyendo su espín. Para el análisis a temperaturas finitas, se parte generalmente del formalismo de interacción de configuraciones, el cual consiste en expresar la función de onda de muchos electrones como una combinación lineal de los determinantes de Slater.

En el lenguaje de segunda cuantización, la función de onda de la Ec. (1) tiene la siguiente forma

$$|n_1, \dots, n_j, n_{j+1}, \dots\rangle = (C_1^\dagger)^{n_1} \dots (C_j^\dagger)^{n_j} (C_{j+1}^\dagger)^{n_{j+1}} \dots |\text{vacío}\rangle, \quad (2)$$

donde  $n_j$  es el número de partículas que se encuentran en el estado cuántico  $j$  del sistema y  $C_j^\dagger$  ( $C_j$ ) es el operador de creación (aniquilación) de partículas en el estado  $j$ . Estos operadores obedecen a las siguientes reglas

$$C_j |n_1, \dots, n_j, n_{j+1}, \dots\rangle = \delta_{1, n_j} (-1)^{s(1, j-1)} |n_1, \dots, n_j - 1, n_{j+1}, \dots\rangle, \quad (3)$$

y

$$C_j^\dagger |n_1, \dots, n_j, n_{j+1}, \dots\rangle = \delta_{0, n_j} (-1)^{s(1, j-1)} |n_1, \dots, n_j + 1, n_{j+1}, \dots\rangle, \quad (4)$$

## Hamiltoniano de Hubbard

donde  $S(i, j) = \sum_{k=i}^j n_k$  determina el signo que nos garantiza la antisimetría de la función de onda ante el intercambio de partículas. Debido a que estamos tratando con fermiones, los posibles estados de ocupación son únicamente 0 y 1, por lo que  $C_j^\dagger|1\rangle = C_j|0\rangle = 0$ . Definamos el operador de número como  $\hat{n}_j = C_j^\dagger C_j$ , es decir

$$\hat{n}_j|n_1, \dots, n_j, n_{j+1}, \dots\rangle = n_j|n_1, \dots, n_j, n_{j+1}, \dots\rangle. \quad (5)$$

Asimismo, los operadores de creación y aniquilación obedecen ciertas reglas de conmutación de acuerdo a las propiedades de simetría del sistema. Para fermiones se cumple la anticonmutación de los operadores

$$\{C_i^\dagger, C_j\} = \delta_{i,j}, \{C_i^\dagger, C_j^\dagger\} = \{C_i, C_j\} = 0, \quad (6)$$

donde  $\{A, B\} \equiv AB + BA$ . Estas relaciones de anticonmutación [Ec. (6)] son equivalentes a la antisimetría de las funciones de onda fermiónicas por el intercambio de partículas.

En resumen, la teoría cuántica de muchas partículas se puede formular más conveniente en el lenguaje de segunda cuantización, es decir, en términos de los números de ocupación. Esta formulación se basa directamente en la noción de la indistinguibilidad de las partículas cuánticas y el hecho de que los estados de una sola partícula forman una base del espacio de Hilbert de  $N$  partículas. En el formalismo de segunda cuantización todos los operadores pueden expresarse en términos de los operadores de creación y aniquilación fundamentales, como veremos en la próxima sección donde se discutirá el modelo de Hubbard en forma detallada.

## 1.2 Hamiltoniano de Hubbard

En 1963, J. Hubbard propuso un hamiltoniano multifermiónico basado en las funciones de Wannier  $[\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)]$ , el cual se expresa en términos de los operadores de creación y aniquilación locales. La expresión original del hamiltoniano es [Hubbard, 1963]

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} U_{ij}^{kl} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'}^\dagger c_{k,\sigma'} c_{l,\sigma}, \quad (7)$$

donde

$$t_{ij} \equiv \langle i|h|j\rangle = \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + u(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (8)$$

$$U_{ij}^{kl} \equiv \langle ij|v|lk\rangle = \int d^3r d^3r' \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) \varphi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_k), \quad (9)$$

## Hamiltoniano de Hubbard

y  $u(\mathbf{r})$  es el potencial que experimenta un electrón debido a todos los iones. Para sistemas de bandas angostas (orbitales  $3d$ ), Hubbard estimó que los órdenes de magnitud de los términos de la interacción electrón-electrón son [Hubbard, 1963]

$$U \equiv \langle ii | v | ii \rangle \approx 20eV, \quad (10)$$

$$V \equiv \langle ij | v | ij \rangle \approx 3eV, \quad (11)$$

$$\Delta t \equiv \langle ii | v | ij \rangle \approx 0.5eV, \quad (12)$$

$$\Delta t_3 \equiv \langle ij | v | ik \rangle \approx 0.1eV. \quad (13)$$

donde  $\mathbf{R}_i$  es primer vecino de  $\mathbf{R}_j$  y  $\mathbf{R}_k$ , mientras que  $\mathbf{R}_j$  y  $\mathbf{R}_k$  son segundos vecinos entre sí.

Sin embargo, los parámetros  $U_{ij}^{kl}$  en la Ec. (7) pueden contener interacciones indirectas, tales como interacción electrón-electrón vía fonón que no se encuentran en la Ec. (9). Por ejemplo, el parámetro  $U$  podría tomar un valor negativo, similar al considerado en la teoría BCS, el cual conduce a la superconductividad con simetría  $s$ . Así mismo,  $V < 0$  podría llevarnos a la superconductividad anisotrópica, pero tiene como defecto intrínseco la formación del estado de separación de fase, la cual inhibe el estado base superconductor conforme crece la intensidad de la atracción [Dagotto, *et al.*, 1994]. Por otro lado se ha mostrado que el salto a primeros vecinos ( $\Delta t$ ) produce superconductividad con simetría  $s$  extendida [Hirsch, *et al.*, 1989]. Recientemente, se ha encontrado que una pequeña interacción carga-enlace a segundos vecinos ( $\Delta t_3$ ) conduce a superconductividad con simetría  $d$  en redes cuadradas [Pérez, *et al.*, 2002].

Tomando en cuenta estos antecedentes, si consideramos solamente las cuatro interacciones anteriores y el salto a segundos vecinos ( $t'_0$ ), el hamiltoniano de Hubbard [Ec. (7)] toma la siguiente forma

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -t_0 \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} - t'_0 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j \\ & + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} (\hat{n}_{i,-\sigma} + \hat{n}_{j,-\sigma}) + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}^\dagger \hat{n}_l, \end{aligned} \quad (14)$$

donde  $\hat{n}_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ ,  $\hat{n}_i = \hat{n}_{i,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow}$ ,  $\langle i, j \rangle$  representa a los vecinos más cercanos y  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  denota los segundos vecinos. El término de salto correlacionado a primer vecino ( $\Delta t$ ) puede interpretarse como el salto de un electrón dado que el otro se encuentre en el sitio inicial o final del salto, mientras que para el salto



## Hamiltoniano de Hubbard

correlacionado a segundos vecinos ( $\Delta t_3$ ), dicho salto depende de la ocupación de un segundo electrón que se encuentre a un primer vecino de los sitios tanto inicial como final del primer electrón [Pérez, *et al.*, 2001].

Es importante hacer énfasis acerca de la diferencia entre los términos de dos y cuatro operadores. Los primeros están relacionados con el movimiento de los electrones en la red, es decir, con la energía cinética, mientras que los términos de cuatro operadores describen la interacción electrón-electrón, la cual puede ser del tipo densidad-densidad o carga-enlace, esta última también puede denominarse como salto correlacionado.

Para el caso de los huecos, el hamiltoniano dado en la Ec. (14) se transforma, usando la regla

$$c_{i,\sigma}^\dagger \rightarrow h_{i,\sigma} \text{ y } c_{i,\sigma} \rightarrow h_{i,\sigma}^\dagger \quad (15)$$

a la siguiente expresión [Pérez, *et al.*, 2001]

$$\begin{aligned} \hat{H} = & (U + 2ZV)(N_s - \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma}^h) + (t_0 - 2\Delta t) \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^\dagger h_{j,\sigma} + \\ & + (t'_0 - 4\Delta t_3) \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^\dagger h_{j,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow}^h \hat{n}_{i,\downarrow}^h + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i^h \hat{n}_j^h + \\ & + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^\dagger h_{j,\sigma} (\hat{n}_{i,-\sigma}^h + \hat{n}_{j,-\sigma}^h) + \Delta t_3 \sum_{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle, \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} h_{i,\sigma}^\dagger h_{j,\sigma} \hat{n}_l^h. \end{aligned} \quad (16)$$

donde  $\hat{n}_{i,\sigma}^h = h_{i,\sigma}^\dagger h_{i,\sigma}$  y  $\hat{n}_i^h = \hat{n}_{i,\uparrow}^h + \hat{n}_{i,\downarrow}^h$ . Observamos que este hamiltoniano para huecos [Ec. (16)] y aquel para electrones [Ec. (14)] son esencialmente los mismos, ya que el primer término de la Ec. (16) contribuye únicamente a un corrimiento de la energía y los huecos tienen saltos efectivos  $t_h = t_0 - 2\Delta t$  y  $t'_h = t'_0 - 4\Delta t_3$  a primeros y segundos vecinos, respectivamente.

A continuación, reescribiremos el hamiltoniano de Hubbard tanto para electrones [Ec. (14)] como para huecos [Ec.(16)] en el espacio recíproco. En el caso de huecos, partimos de la transformada de Fourier de los operadores de aniquilación y creación para huecos

$$\begin{aligned} h_{i,\sigma}^\dagger &= N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} h_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \\ h_{i,\sigma} &= N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} h_{\mathbf{k},\sigma}, \end{aligned} \quad (17)$$

## Hamiltoniano de Hubbard

y sustituyendo en la ecuación Ec. (16) se obtiene -como se muestra en el Apéndice A- que

$$\begin{aligned} \hat{H} = & (U + 2ZV)N_s + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_0^h(\mathbf{k}) h_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger h_{\mathbf{k},\sigma} + \\ & \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} h_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^\dagger h_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^\dagger h_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} h_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\uparrow} + \\ & \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\sigma} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} h_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger h_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger h_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma} h_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma} \end{aligned} \quad (18)$$

donde  $N_s$  es el número total de sitios,

$$\varepsilon_0^h(\mathbf{k}) = -U - 2ZV + 2t_h [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4t'_h \cos(k_x a) \cos(k_y a), \quad (19)$$

es la relación de dispersión,  $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}$  y  $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}$  están definidos en una red cuadrada (sin distorsión) como [Pérez, *et al.*, 2002]

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} = & U + V \beta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \Delta t [\beta(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \beta(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \beta(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \beta(-\mathbf{k}' + \mathbf{q})] \\ & + \Delta t_3 [\gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \gamma(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, -\mathbf{k}' + \mathbf{q})], \end{aligned} \quad (20)$$

y

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} = \frac{V}{2} \beta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \Delta t_3 \gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}' + \mathbf{q}), \quad (21)$$

donde

$$\beta(\mathbf{k}) = 2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)], \quad (22)$$

$$\gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 4 \cos(k_x a) \cos(k'_y a) + 4 \cos(k'_x a) \cos(k_y a), \quad (23)$$

siendo  $2\mathbf{q}$  el vector de onda del centro de masa de los pares. Nótese que el primer término en la Ec. (18) es también una constante que modifica únicamente el origen de la energía. Análogamente, para el caso de electrones el hamiltoniano de Hubbard en el espacio  $\mathbf{k}$  está dado por

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_0(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\uparrow} + \\ & + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\sigma} W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma}, \end{aligned} \quad (24)$$

donde

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = 2t_0 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4t'_0 \cos(k_x a) \cos(k_y a), \quad (25)$$

## Método de Mapeo

es la relación de dispersión para electrones. En la siguiente sección discutiremos el método de mapeo para el estudio de dos partículas y el caso de muchas partículas se discutirá en el capítulo 3 partiendo de las ecuaciones (18) y (24).

### 1.3 Método de Mapeo

A pesar de la sencillez del modelo de Hubbard, éste tiene solución exacta sólo en sistemas de una e infinitas dimensiones. En los últimos años, se ha mapeado el problema de correlación electrónica a uno de amarre fuerte con impurezas [Navarro, *et al.*, 1992], el cual se denomina método de mapeo. Para un sistema de dimensión  $d$  con  $n$  partículas el problema es equivalente al de amarre fuerte con impurezas que se encuentra en un espacio de  $nd$  dimensiones. En particular, el problema de dos partículas puede abordarse introduciendo un vector  $\mathbf{K}$  del centro de masa del par. Como un ejemplo de este método, consideremos a dos electrones ambos con espín hacia arriba [Navarro, *et al.*, 1993] en una cadena lineal de cuatro sitios, tomando en cuenta el principio de exclusión de Pauli los posibles estados son

$$\begin{aligned} |1\rangle &= |\uparrow, \uparrow, 0, 0\rangle, & |2\rangle &= |\uparrow, 0, \uparrow, 0\rangle, \\ |3\rangle &= |\uparrow, 0, 0, \uparrow\rangle, & |4\rangle &= |0, \uparrow, 0, \uparrow\rangle, \\ |5\rangle &= |0, \uparrow, \uparrow, 0\rangle, & |6\rangle &= |0, 0, \uparrow, \uparrow\rangle, \end{aligned}$$

los cuales pueden representarse como parte de una red cuadrada (figura 1.3.1.).

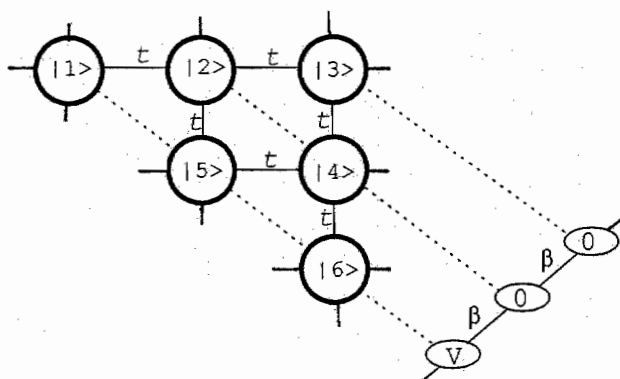


Figura 1.3.1. Representación de los estados de dos partículas con espín paralelo en una cadena lineal.

Dentro del modelo de Hubbard [Ec.(14)] los estados  $|1\rangle$ ,  $|5\rangle$  y  $|6\rangle$  tienen una autoenergía  $V$ , mientras que los estados restantes tienen autoenergía igual a cero. Aprovechando la simetría traslacional en la red de estados, proyectamos la red

## Método de Mapeo

de estados original a una cadena lineal con una impureza  $V$ . El parámetro de salto de la red proyectada es  $\beta = 2t \cos(Ka/2)$ , donde  $a$  es la constante de red y  $K$  es el vector de onda del centro de masa de las dos partículas. Para el caso de una red cuadrada con dos partículas y espín paralelo, el problema se mapea a una red cuadrada con dos tipos de impurezas, a saber, impurezas tipo de sitio con autoenergía  $V$  e impurezas tipo de enlace con amplitud de salto  $\beta_{\pm}^{imp}$  como se muestra en la figura 1.3.2.

Los parámetros de salto en la red proyectada  $\beta_x, \beta_y, \beta_{\pm}$  y  $\beta_{\pm}^{imp}$  (ver figura 1.3.2.) están dados por  $\beta_x = 2t_0 \cos(K_x a/2)$ ,  $\beta_y = 2t_0 \cos(K_y a/2)$ ,  $\beta_{\pm} = 2t'_{\pm} \cos[(K_x \pm K_y)a/2]$ ,  $\beta_{\pm}^{imp} = 2t_3 \cos[(K_x \pm K_y)a/2]$ , donde  $t_3 = t'_{\pm} + \Delta t_3^{\pm}$ ,  $(K_x, K_y)$  es el vector de onda del centro de masa del par y  $a$  es la constante de red. Para el caso de huecos se sustituye  $t_h$  y  $t'_h$  por  $t_0$  y  $t'_0$ , respectivamente, en las expresiones anteriores.

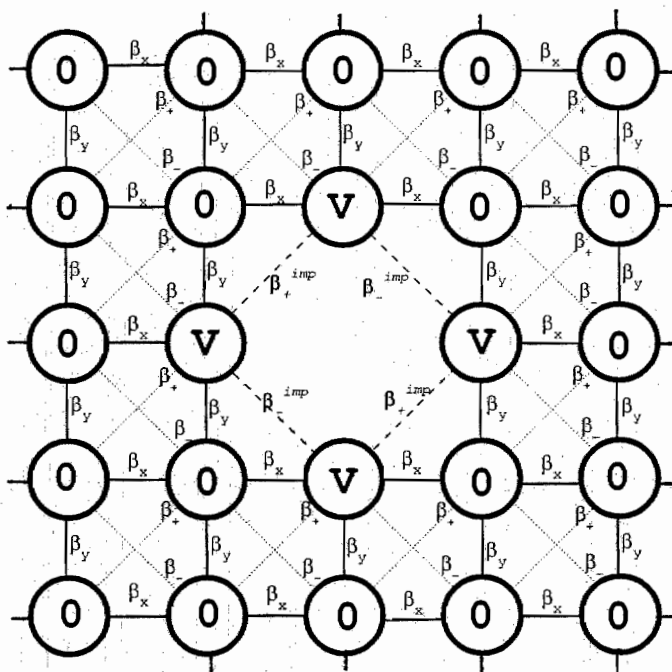


Figura 1.3.2. Representación de los estados de dos partículas con espín triplete en una red cuadrada, proyectados de un hipercubo de 4 dimensiones.

## *Método de Mapeo*

El método de mapeo discutido en la presente sección se utilizará en la sección 2.2 y los detalles del procedimiento para el problema de dos partículas se discuten en el Apéndice B.

## Capítulo 2

# Formación de Pares

El mecanismo de apareamiento entre dos electrones en un sólido vía el intercambio de un fonón, propuesto por L. Cooper, fue un gran paso hacia el desarrollo de la teoría BCS. Hoy en día, se sabe que un par de fermiones con  $\mathbf{k}$  y  $-\mathbf{k}$  comporta como un bosón con respecto a otros pares de fermiones con  $\mathbf{k}'$  y  $-\mathbf{k}'$ , siendo  $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$  [Kaplan, *et al.*, 2005]. En consecuencia estos pares pueden sufrir una condensación de Bose-Einstein, como ocurre en el fenómeno de la superconductividad y de la superfluidez del  $^3\text{He}$ , este último presenta un apareamiento con espín triplete y simetría espacial  $p$  [Leggett, *et al.*, 1975]. En este capítulo analizaremos el apareamiento de electrones y de huecos con espín singulete y triplete en una red cuadrada.

### 2.1 Pares con Espín Singulete y Triplete

Hemos comentado que la teoría BCS trata con todo detalle únicamente el apareamiento con espín singulete, ya que en general estos pares tienen una energía de amarre mayor que la de los pares con espín triplete (ver Apéndice C). En esta sección se discuten las diferencias esenciales del apareamiento singulete y triplete.

Para el caso de que el hamiltoniano no dependa explícitamente del espín, la función de onda de dos fermiones  $[\Phi(1, 2)]$  puede escribirse como

$$\Phi(1, 2) = \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\sigma(1, 2), \quad (26)$$

donde  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  y  $\sigma(1, 2)$  representan las componentes espacial y de espín de la función de onda  $\Phi(1, 2)$ , respectivamente. Para el caso singulete

$$\sigma_S(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)], \quad (27)$$

mientras que para el triplete tenemos tres posibilidades

$$\sigma_T(1, 2) = \begin{cases} \alpha(1)\alpha(2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \\ \beta(1)\beta(2) \end{cases}, \quad (28)$$

## Pares con Espín Singulete y Triplete

donde  $\alpha(i)$  y  $\beta(i)$  representan respectivamente estados de espín electrónico hacia arriba y hacia abajo. En consecuencia,  $\Psi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  y  $\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  son respectivamente simétrica y antisimétrica ante el intercambio de partículas, puesto que la  $\Phi(1, 2)$  tiene que ser antisimétrica.

Consideremos un sistema con un mar de Fermi lleno a  $T = 0$  representado por  $|0\rangle$ , al cual se le incorporan dos partículas más, si  $\mathbf{k}_1$  y  $\mathbf{k}_2$  son los vectores de onda de tales fermiones, entonces la condición de reposo del centro de masa implica que  $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$  y su función de onda con espín singulete puede expresarse

$$|\Phi\rangle_S = \sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_F} A(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad (29)$$

donde  $A(\mathbf{k}) = A(-\mathbf{k})$  y  $\sum_{\mathbf{k}} |A(\mathbf{k})|^2 = 1$ . La energía de estas partículas se encuentra entre la energía de Fermi  $E_F$  y  $E_F + \hbar\omega_D$ , donde  $\omega_D$  es la frecuencia de Debye. Esta restricción asegura que la interacción electrón-electrón vía fonón sea atractiva [Thinkam, 1996].

Partimos de un hamiltoniano en el espacio recíproco con interacción electrón-electrón y conservación de número de fermiones, el cual puede escribirse como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'} c_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (30)$$

En particular, cuando  $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} = -V_1 = cte$ , es decir, el caso estudiado en la teoría BCS, el hamiltoniano de la Ec. (30) aplicado a la función de onda  $|\Phi\rangle_S$  conduce -como se demuestra en el Apéndice C.1- a una energía del estado enlazado ( $E_S$ ) de un par con espín singulete, dada por

$$E_S = -2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{N(0)V_1}}, \quad (31)$$

donde  $N(0)$  es la densidad de estados a  $E = E_F$  y se supone  $N(0)V_1 \ll 1$ , cuyo significado físico es el de un acoplamiento débil.

Por otro lado, para un par de electrones con espín triplete ocupando individualmente los estados  $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$  y  $|-\mathbf{k}, \sigma\rangle$ , la situación es similar al caso anterior, es decir, la función de onda de un par toma la forma

$$|\Phi\rangle_T = \sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_F} A(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \sigma}^\dagger |0\rangle, \quad (32)$$

donde  $A(\mathbf{k}) = -A(-\mathbf{k})$  y  $\sum_{\mathbf{k}} |A(\mathbf{k})|^2 = 1$ . Aplicando el mismo hamiltoniano [Ec. (30)] a  $|\Phi\rangle_T$  el apareamiento podría ocurrir si consideramos un potencial de

## Apareamiento en la Red Cuadrada

interacción que dependa de la dirección. Por ejemplo,

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = -V_1 - V_2 \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{|\mathbf{k}||\mathbf{k}'|}, \quad (33)$$

con  $V_2 \geq 0$ , en este caso la energía del estado del par triplete es (ver el Apéndice C.2)

$$E_T = -2\hbar\omega_D e^{-\frac{6}{N(0)V_2}}, \quad (34)$$

cuando  $N(0)V_2 \ll 1$ .

Por último, en el Apéndice C.3 se discute el caso singlete con un potencial como el de la Ec. (33), el cual da una energía del estado del par ( $E'_S$ )

$$E'_S = -2\hbar\omega_D e^{-\frac{6}{N(0)(3V_1+V_2)}}, \quad (35)$$

que se reduce a la Ec. (31) si  $V_2 = 0$ . Por lo tanto, la naturaleza del estado base depende de los valores de  $V_1$  y  $V_2$ , es decir, para  $V_2 > 0$  la condición  $V_1 > 0$  ó  $V_1 < 0$  nos da el estado base tipo singlete ó triplete, respectivamente. En resumen en esta sección hemos visto un hamiltoniano específico, el cual bajo ciertas condiciones podría conducir a un estado base con espín triplete. El caso de la condensación de muchos pares con espín triplete lo analizaremos en los capítulos 3 y 4.

## 2.2 Apareamiento en la Red Cuadrada

En esta sección analizamos la competencia entre pares con espín singlete y con espín triplete en una red cuadrada, la cual tiene una distorsión infinitesimal de los ángulos rectos de los cuadrados (Figura 2.2.1). Como veremos más adelante, esta distorsión favorece el apareamiento tipo triplete, ya que los parámetros de salto a segundos vecinos se modifican dependiendo de la dirección de salto y en consecuencia se rompe la degeneración de los estados  $p$ . En la figura 2.2.1 se muestra un cuadrado distorsionado, donde el salto y salto correlacionado a primeros vecinos ( $t_0$  y  $\Delta t$ ) se mantienen constantes, mientras que los parámetros de salto y de salto correlacionado a segundos vecinos ( $t'_0$  y  $\Delta t_3$ ) se transforman a ( $t'_+ = t'_0 + \delta'$ ,  $t'_- = t'_0 - \delta'$ ,  $\Delta t_3^+ = \Delta t_3 + \delta_3$  y  $\Delta t_3^- = \Delta t_3 - \delta_3$ ), aquí el signo + indica la dirección de salto en  $\mathbf{x} + \mathbf{y}$  mientras que - indica la dirección de salto en  $\mathbf{x} - \mathbf{y}$ . Así mismo,  $\delta' = (t'_+ - t'_-)/2$  y  $\delta_3 = (\Delta t_3^+ - \Delta t_3^-)/2$ .



## Apareamiento en la Red Cuadrada

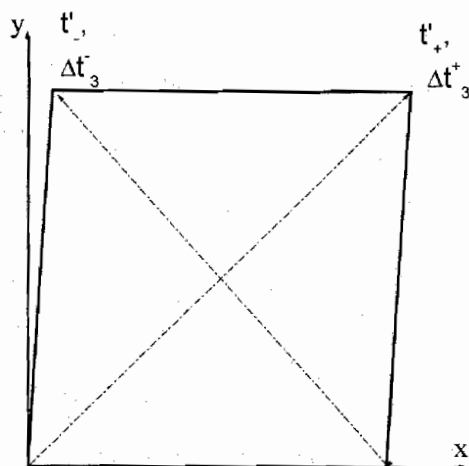


Figura 2.2.1. La distorsión de la red cuadrada ocasiona una asimetría entre las direcciones  $x \pm y$  de las integrales de salto y salto correlacionado a segundos vecino ( $t'$  y  $\Delta t_3$ ).

### 2.2.1. Asimetría entre Apareamiento de Electrones y de Huecos

Un apareamiento ocurre si la energía  $\Delta_2 \equiv 2E_1 - E_2$  es mayor que cero, donde  $E_n$  es la energía del estado base de  $n$  partículas. Las figuras 2.2.2.(a) y (b) muestran los diagramas de fases para electrones y para huecos respectivamente, en el espacio de parámetros  $\delta'/t_0$  y  $\delta_3/t_0$ , para  $t_0 = 1.0$ ,  $U = 10t_0$ ,  $V = 0$ ,  $\Delta t = 0.5t_0$ ,  $(t'_+ + t'_-)/2 = 0.45t_0$ ,  $(\Delta t_3^+ + \Delta t_3^-)/2 = 0.1t_0$ . La línea punteada indica la excepción de estados apareados con simetría  $p$  en  $\delta_3 = 0$ . Los cálculos numéricos se hicieron para una red cuadrada proyectada de 1741 estados efectivos con el mismo procedimiento explicado en el Apéndice B.

Obsérvese la asimetría entre el apareamiento de electrones y de huecos, donde el triplete de electrones tiene una región más grande de simetría  $p$  y requiere solo de una distorsión infinitesimal en la interacción del salto correlacionado a segundos vecinos, en contraste al favorecido apareamiento de huecos con simetría  $d$  cuando la distorsión es pequeña. En la figura 2.2.2.(a) el origen corresponde a un estado  $s$  no apareado, mientras que para el caso de los huecos, figura 2.2.2.(b), el origen es un estado  $d$  y los estados sobre el eje horizontal son también  $d$  hasta la línea de transición a estados  $p$ , a partir de la cual no hay estados apareados. Estos resul-

## Apareamiento en la Red Cuadrada

tados reflejan la importancia del salto correlacionado  $\Delta t_3$  para el apareamiento de huecos con simetría  $d$ , como  $\delta_3$  lo es para el caso de simetría  $p$  en pares de electrones.

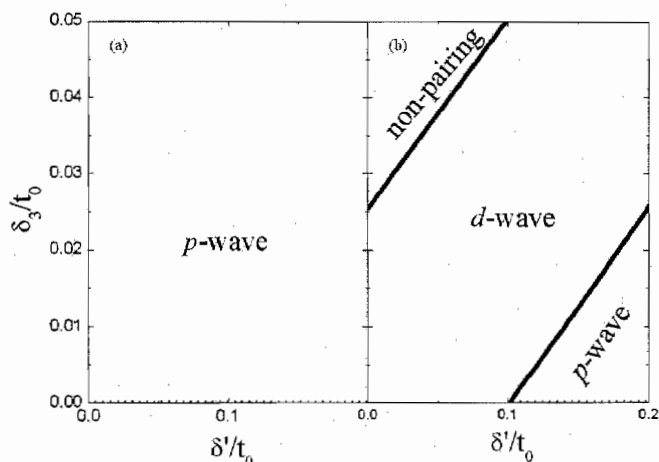


Figura 2.2.2. Diagrama de fases en el espacio  $\delta'/t_0$  y  $\delta_3/t_0$  (a) para dos electrones y (b) para dos huecos. En ambos casos los parámetros del hamiltoniano son  $U=10t_0$ ,  $V=0$ ,  $\Delta t = 0.5t_0$ ,  $(t'_+ + t'_-)/2 = 0.45t_0$ ,  $(\Delta t_3^+ + \Delta t_3^-)/2 = 0.1t_0$ .

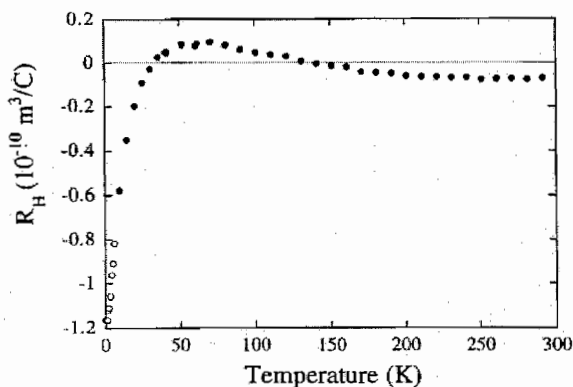


Figura 2.2.3. Coeficiente de Hall ( $R_H$ ) obtenido experimentalmente del  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  [Mackenzie, *et al.*, 1996].

Los resultados de la figura 2.2.2 son consistentes con la propiedad de simetría y del tipo de portadores de carga de la mayoría de los superconductores de alta

$T_c$ , en los cuales generalmente los portadores de carga son huecos, mientras que la simetría  $p$  se observa en sistemas de electrones como es el caso de  $Sr_2RuO_4$  [Maeno, *et al.*, 1994]. En la figura 2.2.3 mostramos la figura 2 de la referencia [Mackenzie, *et al.*, 1996], para observar el comportamiento del coeficiente de Hall  $R_H$  para el  $Sr_2RuO_4$  cuando la temperatura tiende a cero.

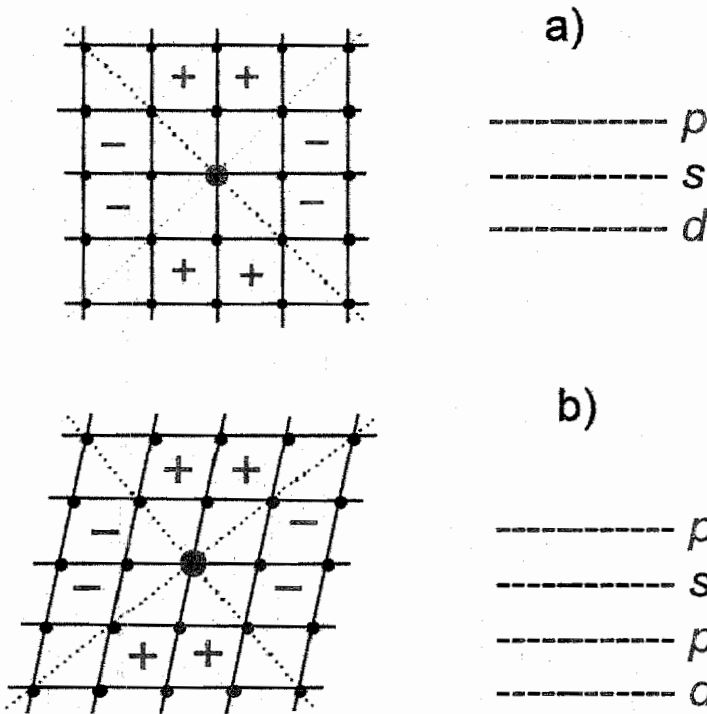


Figura 2.2.4. Signos y nodos (líneas punteadas) de la función de onda de dos huecos en el estado base para (a) una red cuadrada normal y (b) una red con distorsión. En ambos casos se usan los mismos parámetros del hamiltoniano como los de la figura 2.2.2.(b).

Por otra parte, con el fin de ilustrar el efecto de la distorsión, mostramos esquemáticamente en la figura 2.2.4 la simetría espacial así como los niveles energéticos más bajos de un par de huecos en el estado base antes (a) y después (b) de la distorsión. Cuando hablamos de la simetría  $d_{x^2-y^2}$  nos referimos a la función de onda del par que tiene una simetría similar a los orbitales  $d_{x^2-y^2}$ . Los nodos y los signos de dicha función -ver tabla B.2- de onda están representados respectivamente por las líneas punteadas y por los símbolos + y - en la figura 2.2.4.(a). Podemos observar el or-

den de los niveles energéticos en que se encuentran las simetrías de apareamiento encontrándose a la simetría  $d$  como el estado base, siguiendo a la simetría  $s$  como el primer estado excitado y más arriba se encuentran los dos estados degenerados  $p$ .

Cuando la distorsión es considerada el desdoblamiento de los estados  $p$  no es suficiente para que uno de ellos pueda pasar al estado base, a menos que la distorsión sea suficientemente grande. Esta situación es reflejada en el diagrama de fases para huecos de la figura 2.2.2.(b).

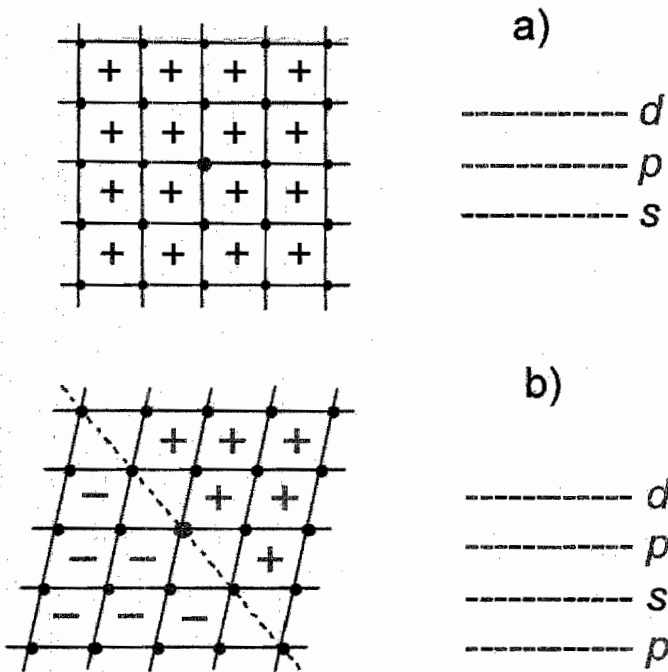


Figura 2.2.5. Signos y nodos (líneas punteadas) de la función de onda de dos electrones en el estado base para (a) una red cuadrada normal y (b) una red con distorsión. En ambos casos se usan los mismos parámetros del hamiltoniano como los de la figura 2.2.2.(a).

Para el caso de dos electrones en la red sin distorsión, el estado base es de simetría  $s$  y el primer estado degenerado  $p$  se encuentra relativamente cercano al estado  $s$ , como se muestra en la figura 2.2.5.(a). Una vez que ocurre la distor-

## Apareamiento en la Red Cuadrada

sión -ver tabla B.1-, un desdoblamiento de los estados degenerados  $p$  conduce a un cambio de simetría  $s$  a  $p$  en el nuevo estado base, como se muestra en la figura 2.2.5.(b). La interpretación del diagrama de fases para electrones [figura 2.2.2.(a)] sugiere que los estados degenerados  $p$  se encuentran muy cercanos a los estados  $s$  ya que basta una distorsión infinitesimal de la red para que la simetría  $p$  pase a ocupar el estado base.

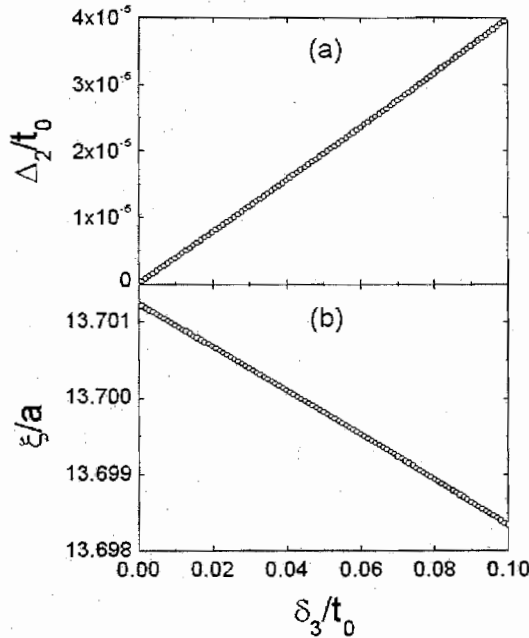


Figura 2.2.6. (a) La energía de apareamiento ( $\Delta_2$ ) y (b) la longitud de coherencia ( $\xi$ ) como función de la distorsión del salto correlacionado ( $\delta_3$ ) para el caso de dos electrones con los mismos parámetros de la figura 2.2.2 y  $\delta' = 0$ .

En lo que se refiere a otras propiedades de los pares, hemos analizado el comportamiento de la longitud de coherencia ( $\xi$ ) y la energía de apareamiento ( $\Delta_2$ ) como función de  $\delta_3$ . La longitud de coherencia puede expresarse como

$$\xi = \langle \mathbf{r}^2 \rangle^{1/2} = \sqrt{\frac{\sum_R \psi^*(\mathbf{r}) \mathbf{r}^2 \psi(\mathbf{r})}{\sum_R \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})}}, \quad (36)$$

donde  $\psi(\mathbf{r})$  es la función de onda de dos partículas y  $\mathbf{r}$  representa las coordenadas internas del par. Cabe mencionar que  $\xi$  se reduce a la longitud de coherencia de

## *Apareamiento en la Red Cuadrada*

la teoría BCS si se introduce un factor numérico de  $2\sqrt{2}/\pi$  [Hirsch, *et al.*, 1989]. En la figura 2.2.6 se muestran la energía de apareamiento ( $\Delta_2$ ) y la longitud de coherencia ( $\xi$ ) para un par de electrones con espín triplete, obtenidas con los mismos parámetros de la figura 2.2.2. Se puede observar un comportamiento casi lineal tanto de la brecha de apareamiento como de la longitud de coherencia en función de  $\delta_3$ . Además, se observa una proporcionalidad inversa entre estas dos cantidades como en la teoría estándar de BCS. más aún, la magnitud de  $\Delta_2$  para apareamiento tipo  $p$  es mucho más pequeño que la correspondiente para  $s^*$  o  $d$  [Pérez, *et al.*, 2001], lo cual concuerda cualitativamente con los datos experimentales [Maeno, *et al.*, 1994].

En resumen, hemos observado que una pequeña distorsión podría conducir el apareamiento de electrones y no de huecos. En el siguiente capítulo estudiaremos el problema de densidad finita y la superconductividad tipo triplete.

## Capítulo 3

# Estados Superconductores

En el lenguaje del modelo de Hubbard, la aproximación de BCS para el potencial de interacción  $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',0} = -cte$  corresponde al caso de  $U < 0$ , excepto que en el caso BCS la interacción es atractiva sólo si los electrones se encuentran cerca de la superficie de Fermi. En estos casos la brecha superconductora es siempre isotrópica. Cuando la interacción entre los electrones situados en sitios más próximos es atractiva ( $V < 0$ ), la brecha superconductora podría ser anisotrópica dependiendo del signo de las integrales de salto entre segundos vecinos. Sin embargo, se ha encontrado que cuando  $V < 0$  el estado base del sistema corresponde al de separación de fases que consiste en un conglomerado de electrones en una región del sistema e inhibe la superconductividad [Dagotto, *et al.*, 1994]. Por otro lado, J.E. Hirsch ha reportado que la interacción carga-enlace entre primeros vecinos ( $\Delta t$ ) podría conducir a un estado base superconductor con simetría  $s^*$  que consiste en la existencia de nodos direccionales conservando el signo en la función de onda de los pares [Hirsch, *et al.*, 1989]. Así mismo, se ha encontrado recientemente que una pequeña interacción carga-enlace entre segundos vecinos ( $\Delta t_3$ ) puede causar la superconductividad con simetría  $d$  [Pérez, *et al.*, 2002]. En este trabajo presentaremos evidencias de que una pequeña distorsión en los ángulos rectos de la red cuadrada -correspondiente a la existencia de  $\Delta t_3^\pm$ - podría ocasionar un estado superconductor con espín triplete y simetría espacial  $p$  [Millán, *et al.*, 2005a].

En este capítulo, dentro del formalismo BCS deduciremos las ecuaciones acopladas del estado superconductor para el hamiltoniano (169), incluyendo la distorsión y sus efectos en  $\Delta t_3$  descritos en la sección 2.2. Dichas ecuaciones acopladas permiten analizar tanto el estado de espín singulete con simetrías espacial  $s^*$  y  $d$ , como el caso triplete con simetría  $p$ . En la primera sección usaremos el método variacional para analizar la superconductividad a  $T = 0$ . En la segunda sección, encontramos las ecuaciones de la brecha superconductora a  $T \neq 0$  usando el método de Bogoliubov [Bogoliubov, 1958] y Valantin [Valantin, 1958]. En la tercera sección, usaremos las ecuaciones obtenidas en la sección previa con el fin de realizar un estudio comparativo entre los estados superconductores con simetrías  $s^*$ ,  $p$  y  $d$ .

### 3.1 Superconductividad a $T = 0$

A continuación presentamos el marco teórico que permite una descripción unificada de la superconductividad con espín singlete y triplete dentro del formalismo BCS, en el cual se consideran los pares que tienen momento del par nulo, es decir,  $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{0}$ , donde  $\mathbf{k}_i$  es el vector de onda del  $i$ -ésimo electrón, ya que dichos pares forman un condensado más estable [Bardeen, *et al.*, 1957]. De esta forma, el hamiltoniano [Ec. (30)] se reescribe como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \sigma, \sigma'}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}', \sigma}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \sigma'} c_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (37)$$

donde  $N_s$  es el número total de sitios. Este hamiltoniano lo podemos aplicar independientemente a una función de onda de pares con espín antiparalelo

$$|\Psi_A\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger}) |0\rangle. \quad (38)$$

o paralelo

$$|\Psi_P\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger}) (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger}) |0\rangle, \quad (39)$$

donde la condición de normalización conduce a

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1, \quad (40)$$

por lo cual  $|v_{\mathbf{k}}|^2$  y  $|u_{\mathbf{k}}|^2$  son las probabilidades de que el estado  $\mathbf{k}$  esté ocupado y desocupado, respectivamente. Nótese que para el caso de espines paralelos, el producto en la Ec. (39) debe restringirse a la mitad de la primera zona de Brillouin ( $1BZ/2$ ), debido a que estamos suponiendo que cada par se forma con estados  $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$  y  $|-\mathbf{k}, \sigma\rangle$ , por lo cual si tomamos en cuenta la primera zona de Brillouin completa estaríamos considerando cada par dos veces. Para regular el número de partículas promedio ( $N$ ) incluimos el término  $\mu \hat{N}$  donde  $\mu$  es el potencial químico y  $\hat{N}$  es el operador del número total de partículas. Debemos minimizar  $\langle \Psi_{\lambda} | \hat{H} - \mu \hat{N} | \Psi_{\lambda} \rangle$  con respecto a  $v_{\mathbf{k}}$  donde el subíndice  $\lambda$  representa los casos de espines paralelos ( $\lambda = P$ ) y antiparalelos ( $\lambda = A$ ). Primeramente analizaremos el caso  $\lambda = A$  por medio de la ecuación [Thinkam, 1996]

$$\delta \langle \Psi_A | \hat{H} - \mu \hat{N} | \Psi_A \rangle = \delta \left[ 2 \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \right] = 0, \quad (41)$$



## Superconductividad a $T = 0$

donde, en nuestro caso,  $\varepsilon_0(\mathbf{k})$  es la relación de dispersión dada por la ecuación (175). Así mismo el potencial de interacción  $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$  queda determinado por la Ec. (170) donde usaremos la condición de centro de masa del par en reposo, *ie*  $2\mathbf{q} = \mathbf{0}$ . El desarrollo de la expresión (41) nos lleva a la ecuación [Pérez, 2002] de la brecha energética a  $T = 0$

$$\Delta_A(\mathbf{k}) = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Delta_A(\mathbf{k}')}{2E_A(\mathbf{k}')}, \quad (42)$$

donde

$$E_A(\mathbf{k}) = \sqrt{(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta_A^2(\mathbf{k})} \quad (43)$$

y las expresiones para  $u_{\mathbf{k}}$ ,  $v_{\mathbf{k}}$  en términos de las energías son

$$u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E_A(\mathbf{k})} \right)}, \quad (44)$$

$$v_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi(\mathbf{k})}{E_A(\mathbf{k})} \right)}, \quad (45)$$

con  $\xi(\mathbf{k}) = (\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)$ .

La ecuación [Pérez, 2002] del número de partículas es

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E_A(\mathbf{k})}, \quad (46)$$

donde  $n = N/N_s$  es la densidad electrónica

Para el caso de espines paralelos desarrollaremos la minimización  $\delta \langle \Psi_P | \hat{H} - \mu \hat{N} | \Psi_P \rangle$  detalladamente, ya que este caso no es tratado en los libros de texto. Sin embargo, como veremos es completamente análoga al caso de espines antiparalelos. Podemos hacer uso de los resultados [Ecs. (278) y (288)] del Apéndice D, para aplicarlos al hamiltoniano de Hubbard [Ec. (169)]

$$\delta \langle \Psi_P | \hat{H} - \mu \hat{N} | \Psi_P \rangle = \delta \left[ 2 \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \right], \quad (47)$$

donde hemos usado el hecho de que

$$N = \langle \Psi_P | \hat{N} | \Psi_P \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2. \quad (48)$$

## Superconductividad a $T = 0$

Nótese que en la Ec. (47) aparece únicamente la parte antisimétrica del potencial de interacción ( $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}$ ) y las sumatorias se efectúan sobre toda la zona de Brillouin, por lo que para el primer término de la Ec. (47) se ha dividido por 2, mientras que el segundo por 4.

Como en el caso anterior de espines antiparalelos, el estado superconductor es considerado como un estado variacional, por lo cual el valor de expectación  $\delta\langle\Psi_P|\hat{H} - \mu\hat{N}|\Psi_P\rangle$  toma un extremo (mínimo) para ciertos valores de  $u_{\mathbf{k}}$  y  $v_{\mathbf{k}}$ . Para encontrar dichos valores buscamos la condición de minimización de la Ec. (47) con respecto a  $v_{\mathbf{k}}^2$

$$\delta\left[\sum_{\mathbf{k}''}\left\{2(\varepsilon_0(\mathbf{k}'') - \mu)v_{\mathbf{k}''}^2 + \frac{1}{N_s}[(1 - v_{\mathbf{k}''}^2)v_{\mathbf{k}''}^2]^{\frac{1}{2}}\sum_{\mathbf{k}'}(W_{\mathbf{k}'',\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k}'',-\mathbf{k}'})u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'}\right\}\right]$$

$$= 2(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu) + \frac{1 - v_{\mathbf{k}}^2 + (1 - v_{\mathbf{k}}^2)}{N_s [(1 - v_{\mathbf{k}}^2)v_{\mathbf{k}}^2]^{\frac{1}{2}}}\sum_{\mathbf{k}'}(W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'})u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} = 0, \quad (49)$$

$$\implies 2(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu) + \frac{1 - 2v_{\mathbf{k}}^2}{N_s [(1 - v_{\mathbf{k}}^2)v_{\mathbf{k}}^2]^{\frac{1}{2}}}\sum_{\mathbf{k}'}(W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'})u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} = 0, \quad (50)$$

entonces

$$2(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu) = -\frac{1 - 2v_{\mathbf{k}}^2}{N_s [(1 - v_{\mathbf{k}}^2)v_{\mathbf{k}}^2]^{\frac{1}{2}}}\sum_{\mathbf{k}'}(W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'})u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} = \frac{(1 - 2v_{\mathbf{k}}^2)}{[(1 - v_{\mathbf{k}}^2)v_{\mathbf{k}}^2]^{\frac{1}{2}}}\Delta_P(\mathbf{k}), \quad (51)$$

donde hemos definido

$$\Delta_P(\mathbf{k}) = -\frac{1}{N_s}\sum_{\mathbf{k}'}(W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'})u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'}. \quad (52)$$

La Ec. (51) puede reescribirse como

$$v_{\mathbf{k}}^4\left(1 + \frac{(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)^2}{\Delta_P^2(\mathbf{k})}\right) - v_{\mathbf{k}}^2\left(1 + \frac{\varepsilon_0^2(\mathbf{k})}{\Delta_P^2(\mathbf{k})}\right) + \frac{1}{4} = 0. \quad (53)$$

$$\implies v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}\left(\frac{\Delta_P^2(\mathbf{k}) + (\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)^2 - \Delta_P^2(\mathbf{k})}{\Delta_P^2(\mathbf{k}) + (\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)^2}\right)}.$$

Si se define

$$E_P(\mathbf{k}) = [(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta_P^2(\mathbf{k})]^{\frac{1}{2}}, \quad (54)$$

entonces

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)^2}{4E_P^2(\mathbf{k})}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{|\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu|}{E_P(\mathbf{k})}\right]. \quad (55)$$

## Descripción Unificada a $T \neq 0$

Obsérvese que la misma relación de  $v_{\mathbf{k}}$  para el caso de espines antiparalelos es obtenida [ver Ec. (45)] y por la condición de normalización,  $u_{\mathbf{k}}$  tiene también la misma expresión en ambos casos. Continuando con el desarrollo, de

$$\Delta_P(\mathbf{k}) = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} (W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}) (v_{\mathbf{k}'}^2 - v_{\mathbf{k}'}^4)^{\frac{1}{2}}, \quad (56)$$

obtenemos

$$\begin{aligned} \Delta_P(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} (W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}) \left[ \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{(\varepsilon_0(\mathbf{k}') - \mu)}{E_P(\mathbf{k}')} \right) - \frac{1}{4} \left( 1 - \frac{(\varepsilon_0(\mathbf{k}') - \mu)}{E_P(\mathbf{k}')} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \\ \Rightarrow \Delta_P(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}'} (W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}) \left[ 1 - \frac{(\varepsilon_0(\mathbf{k}') - \mu)^2}{E_P^2(\mathbf{k}')} \right]^{\frac{1}{2}}, \\ \Rightarrow \Delta_P(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} (W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}) \frac{\Delta_P(\mathbf{k}')}{2E_P(\mathbf{k}')}. \end{aligned} \quad (57)$$

La Ec. (57) corresponde a la de autoconsistencia de la brecha superconductora para el caso triplete a  $T=0$  dentro del modelo de Hubbard. En general, dicha ecuación tiene una restricción debido a que el potencial químico ( $\mu$ ) podría variar en función de la densidad de partículas ( $n$ ) [Hirsch, *et al.*, 1989]. Por lo tanto, las Ecs. (57) y (48) deben satisfacerse simultáneamente. Esta última puede reescribirse utilizando la expresión (55)

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu|}{E_P(\mathbf{k})}. \quad (58)$$

Los sistemas de dos ecuaciones autoconsistentes (42), (46) y (57), (58) son válidos tanto para huecos como para electrones. Así dadas  $T$  y  $n$  podemos encontrar  $\mu$  y  $\Delta_\lambda(\mathbf{k})$  con  $\lambda = A, P$ . Como veremos en la siguiente sección la simetría de los potenciales de interacción  $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$  y  $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$  podría determinar la simetría de la brecha superconductora ( $\Delta_\eta(\mathbf{k})$ ) donde ahora el subíndice  $\eta$  representará a las simetrías  $s^*$ ,  $p$  ó  $d$ .

## 3.2 Descripción Unificada a $T \neq 0$

Cuando realizamos un estudio general de la superconductividad singulete o triplete, un hamiltoniano generalizado tipo BCS que considere a los estados de par  $|\mathbf{k}, \sigma; -\mathbf{k}, \sigma'\rangle$

## Descripción Unificada a $T \neq 0$

tendría la expresión [Mineev, *et al.*, 1999]

$$\hat{H} - \mu\hat{N} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}' \\ \alpha,\beta,\lambda,\mu}} V_{\alpha\beta,\lambda\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') c_{-\mathbf{k},\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k},\beta}^\dagger c_{\mathbf{k}',\lambda} c_{-\mathbf{k}',\mu}, \quad (59)$$

donde  $V_{\alpha\beta,\lambda\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \langle -\mathbf{k}, \alpha; \mathbf{k}, \beta | \hat{H}_{int} | \mathbf{k}', \lambda; -\mathbf{k}', \mu \rangle$ . Así mismo, la antisimetría de los operadores fermiónicos nos lleva a las propiedades de simetría del potencial de interacción

$$V_{\alpha\beta,\lambda\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_{\beta\alpha,\lambda\mu}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_{\alpha\beta,\mu\lambda}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}') = V_{\mu\lambda,\beta\alpha}(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (60)$$

Los elementos de matriz también satisfacen la condición de hermiticidad [Tsuneto, 1998]

$$V_{\alpha\beta,\lambda\mu}^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V_{\lambda\mu,\alpha\beta}(\mathbf{k}', \mathbf{k}). \quad (61)$$

La teoría BCS supone que la formación del estado superconductor se da mediante un superposición coherente de pares de electrones, el cual se forma a partir del estado normal en el que los valores de expectación

$$\begin{aligned} F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= \langle c_{\mathbf{k},\alpha} c_{-\mathbf{k},\beta} \rangle, \\ F_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k}) &= \langle c_{-\mathbf{k},\beta}^\dagger c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger \rangle, \end{aligned} \quad (62)$$

son distintos a cero. La amplitud de par  $[F_{\alpha\beta}(\mathbf{k})]$  es antisimétrica bajo permutación de partículas, es decir

$$F_{\beta\alpha}(-\mathbf{k}) = -F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}). \quad (63)$$

A continuación discutiremos cómo la amplitud de par se transforma bajo rotación en el espacio de espín. Para una partícula con espín 1/2, la matriz unitaria ( $\hat{R}$ ) que rota el estado de espín por un ángulo infinitesimal  $\delta\theta$  alrededor de un eje especificado por un vector unitario  $\mathbf{n}$  es

$$\hat{R} = \hat{1} + i \mathbf{n} \cdot \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \delta\theta, \quad (64)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  son las matrices de Pauli dadas por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (65)$$

Entonces la amplitud del par se transforma como

$$F'_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = \hat{R}_{\alpha\gamma} \hat{R}_{\beta\eta} F_{\gamma\eta}(\mathbf{k}) = \hat{R}_{\alpha\gamma} F_{\gamma\eta}(\mathbf{k}) \hat{R}_{\eta\beta}^T. \quad (66)$$

## Descripción Unificada a $T \neq 0$

Como  $-\sigma_y \sigma \sigma_y = \sigma^T$ , se encuentra que la amplitud de un par con cualquier estado de espín  $[F(\mathbf{k})]$  se transforma como

$$\begin{aligned} F'(\mathbf{k}) &= F(\mathbf{k}) + \frac{i}{2} \delta\theta \mathbf{n} \cdot [\sigma F(\mathbf{k}) - F(\mathbf{k}) \sigma_y \sigma \sigma_y] \\ &= F(\mathbf{k}) + \frac{i}{2} \delta\theta \mathbf{n} \cdot [\sigma F(\mathbf{k}) \sigma_y - F(\mathbf{k}) \sigma_y \sigma] \sigma_y. \end{aligned} \quad (67)$$

Para el caso de espín singulete, la amplitud de par es invariante bajo rotación en el espacio de espín, esto es

$$F^{(1)}(\mathbf{k}) = F(\mathbf{k}) i \sigma_y, \quad (68)$$

ya que  $\sigma_y^2 = 1$ . Así mismo, en el caso de espín triplete la amplitud del par se transforma como un vector, es decir,

$$F^{(3)}(\mathbf{k}) = \mathbf{F}(\mathbf{k}) \cdot i \sigma \sigma_y. \quad (69)$$

Dentro del formalismo BCS, la formación del estado superconductor se analiza considerando la aproximación de campo medio sobre los pares de Cooper, es decir, el hamiltoniano de la Ec. (59) puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \hat{H}_{MF} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \alpha, \beta, \lambda, \mu}} V_{\alpha\beta, \lambda\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \times \\ &\quad \left[ F_{\beta\alpha}^*(\mathbf{k}) + \left( c_{-\mathbf{k}, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}, \beta}^\dagger - F_{\beta\alpha}^*(\mathbf{k}) \right) \right] [F_{\lambda\mu}(\mathbf{k}') + (c_{\mathbf{k}', \lambda} c_{-\mathbf{k}', \mu} - F_{\lambda\mu}(\mathbf{k}'))] \\ &\simeq \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \alpha, \beta, \lambda, \mu}} V_{\alpha\beta, \lambda\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') [F_{\lambda\mu}(\mathbf{k}') c_{-\mathbf{k}, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}, \beta}^\dagger + \\ &\quad F_{\beta\alpha}^*(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}', \lambda} c_{-\mathbf{k}', \mu} - F_{\beta\alpha}^*(\mathbf{k}) F_{\lambda\mu}(\mathbf{k}')], \end{aligned} \quad (70)$$

En general, el potencial de interacción puede reescribirse separando las partes par ( $V^{(e)}$ ) e impar ( $V^{(o)}$ ) en el espacio de momentos como

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta, \lambda\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{1}{2} (\delta_{\alpha\lambda} \delta_{\beta\mu} - \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\lambda}) V^{(e)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \\ &\quad + \frac{1}{2} (\delta_{\alpha\lambda} \delta_{\beta\mu} + \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\lambda}) V^{(o)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (71)$$

donde

$$V^{(e)}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V^{(e)}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}') = V^{(e)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (72)$$

y

$$V^{(o)}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V^{(o)}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}') = -V^{(o)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'). \quad (73)$$

## Descripción Unificada a $T \neq 0$

Así mismo, la brecha superconductoras  $[\tilde{\Delta}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})]$  se puede definir como

$$\tilde{\Delta}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}', \lambda\mu} V_{\alpha\beta, \lambda\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') F_{\lambda\mu}(\mathbf{k}') \quad (74)$$

y consecuentemente

$$\tilde{\Delta}_{\beta\alpha}^*(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}', \lambda\mu} V_{\lambda\mu, \alpha\beta}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) F_{\lambda\mu}^*(\mathbf{k}'), \quad (75)$$

por lo que  $\tilde{\Delta}_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$  es una función impar ante intercambio de partículas, es decir,

$$\tilde{\Delta}_{\alpha\beta}(-\mathbf{k}) = -\tilde{\Delta}_{\beta\alpha}(\mathbf{k}). \quad (76)$$

En analogía con la amplitud del par, las brechas superconductoras para el caso singlete  $[\tilde{\Delta}^{(1)}(\mathbf{k})]$  y triplete  $[\tilde{\Delta}^{(3)}(\mathbf{k})]$  -con espines de los pares bien definidos- pueden definirse como

$$\tilde{\Delta}^{(1)}(\mathbf{k}) = \Delta^{(1)}(\mathbf{k}) i \sigma_y, \quad (77)$$

y

$$\tilde{\Delta}^{(3)}(\mathbf{k}) = \Delta^{(3)}(\mathbf{k}) \cdot i \boldsymbol{\sigma} \sigma_y, \quad (78)$$

donde usando la ecuación de (76) se tiene que

$$\Delta^{(1)}(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} V^{(e)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') F(\mathbf{k}'), \quad (79)$$

y

$$\Delta^{(3)}(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} V^{(o)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \mathbf{F}(\mathbf{k}'). \quad (80)$$

Usando la definición de la brecha superconductoras [Ec. (74)], la ecuación (70) se convierte a

$$\begin{aligned} \hat{H}_{MF} = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] \left( c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} - c_{-\mathbf{k}, \sigma} c_{-\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] + \\ & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \beta} \left[ \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \beta}^\dagger + \Delta_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k}) c_{-\mathbf{k}, \alpha} c_{\mathbf{k}, \beta} + \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) F_{\beta\alpha}^*(\mathbf{k}) \right]. \end{aligned} \quad (81)$$

Es conveniente expresar esta ecuación en forma matricial, es decir,

$$\hat{H}_{MF} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}}^\dagger \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \beta} \Delta_{\mathbf{k}, \alpha\beta} F_{\mathbf{k}, \beta\alpha}^\dagger + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu], \quad (82)$$

donde

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] \delta_{\alpha\beta} & \tilde{\Delta}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) \\ \tilde{\Delta}_{\alpha\beta}^*(\mathbf{k}) & -[\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] \delta_{\alpha\beta} \end{bmatrix} \quad (83)$$

## Descripción Unificada a $T \neq 0$

es una matriz de  $4 \times 4$  y

$$\tilde{C}_{\mathbf{k}} \equiv \begin{bmatrix} c_{\mathbf{k},\alpha} \\ c_{-\mathbf{k},\alpha}^\dagger \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{\mathbf{k},\downarrow} \\ c_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{bmatrix}. \quad (84)$$

El hamiltoniano de la Ec. (82) puede diagonalizarse usando una transformación unitaria de Bogoliubov, la cual no afecta las propiedades de anticonmutación y transforma los operadores fermiónicos  $c_{\mathbf{k},\alpha}$  a nuevos operadores fermiónicos  $d_{\mathbf{k},\alpha}$ , es decir,

$$\tilde{C}_{\mathbf{k}} = U_{\mathbf{k}} \tilde{D}_{\mathbf{k}}, \quad (85)$$

donde

$$U_{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} u_{\mathbf{k},\alpha\beta} & v_{\mathbf{k},\alpha\beta} \\ v_{-\mathbf{k},\alpha\beta}^* & u_{-\mathbf{k},\alpha\beta}^* \end{bmatrix}, \quad (86)$$

$$\tilde{D}_{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} d_{\mathbf{k},\beta} \\ d_{-\mathbf{k},\beta}^\dagger \end{bmatrix}, \quad (87)$$

siendo  $u_{\mathbf{k},\alpha\beta}$  y  $v_{\mathbf{k},\alpha\beta}$  matrices de  $2 \times 2$  en el espacio de espín, las cuales quedan determinadas como [Mineev, *et al.*, 1999]

$$u_{\mathbf{k},\alpha\beta} = \frac{[E_\eta(\mathbf{k}) + (\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)]\delta_{\alpha\beta}}{\sqrt{[E_\eta(\mathbf{k}) + (\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)]^2 + \Delta_\eta^2(\mathbf{k})}} = u_{\mathbf{k}}\delta_{\alpha\beta},$$

$$v_{\mathbf{k},\alpha\beta} = -\frac{\tilde{\Delta}_{\mathbf{k},\alpha\beta}}{\sqrt{[E_\eta(\mathbf{k}) + (\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)]^2 + \Delta_\eta^2(\mathbf{k})}}. \quad (88)$$

En las ecuaciones (88),  $E_\eta(\mathbf{k})$  es la energía de excitación, es decir, la energía requerida para romper un par en el estado  $\mathbf{k}$  con simetría  $\eta$ . Para el caso singlete tenemos

$$E_\eta(\mathbf{k}) = \sqrt{(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)^2 + |\Delta^{(1)}(\mathbf{k})|^2} = \sqrt{(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta_\eta^2 |g(\mathbf{k})|^2}, \quad (89)$$

con  $\eta = s^*$ , *d*. Para el caso de espín triplete

$$E_\eta(\mathbf{k}) = \sqrt{(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)^2 + |\Delta^{(3)}(\mathbf{k})|^2} = \sqrt{(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta_\eta^2 |\mathbf{P}(\mathbf{k})|^2}, \quad (90)$$

con  $\eta = p$ . En la ecuación (90),  $\mathbf{P}(\mathbf{k})$  es un vector antisimétrico ya que  $\Delta^{(3)}(\mathbf{k})$  es la parte espacial de la brecha superconductor.

Definiendo

$$E_{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} E_\eta(\mathbf{k})\delta_{\alpha\beta} & 0 \\ 0 & -E_\eta(\mathbf{k})\delta_{\alpha\beta} \end{bmatrix}, \quad (91)$$

## Descripción Unificada a $T \neq 0$

se cumple la identidad [Mineev, *et al.*, 1999]

$$\sum_{\mathbf{k}} \tilde{C}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \varepsilon_{\mathbf{k}} \tilde{C}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{D}_{\mathbf{k}}^{\dagger} E_{\mathbf{k}} \tilde{D}_{\mathbf{k}}, \quad (92)$$

además

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{D}_{\mathbf{k}}^{\dagger} E_{\mathbf{k}} \tilde{D}_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} E_{\eta}(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} d_{\mathbf{k}, \alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} E_{\eta}(\mathbf{k}) d_{-\mathbf{k}, \alpha} d_{-\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \alpha} E_{\eta}(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} d_{\mathbf{k}, \alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} E_{\eta}(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (93)$$

Así, el hamiltoniano de la Ec (82) toma la forma

$$\hat{H}_{MF} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}, \alpha} E_{\eta}(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} d_{\mathbf{k}, \alpha}, \quad (94)$$

donde el término

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha \beta} \tilde{\Delta}_{\alpha \beta}(\mathbf{k}) F_{\beta \alpha}^{\dagger}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} [(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu) - E_{\eta}(\mathbf{k})], \quad (95)$$

es la energía del estado base.

Por otra parte, usando las transformaciones de Bogoliubov [Ec. (85)] la amplitud del par puede expresarse en términos de los nuevos operadores ( $d_{\mathbf{k}, \gamma}$ ), esto es

$$\begin{aligned} F_{\lambda \mu}(\mathbf{k}) &= \langle c_{\mathbf{k}, \lambda} c_{-\mathbf{k}, \mu} \rangle \\ &= \left\langle \left[ \sum_{\gamma} (u_{\mathbf{k}, \lambda \gamma} d_{\mathbf{k}, \gamma} + v_{\mathbf{k}, \lambda \gamma} d_{-\mathbf{k}, \gamma}^{\dagger}) \right] \left[ \sum_{\delta} (u_{-\mathbf{k}, \mu \delta} d_{-\mathbf{k}, \delta} + v_{-\mathbf{k}, \mu \delta} d_{\mathbf{k}, \delta}^{\dagger}) \right] \right\rangle. \end{aligned} \quad (96)$$

Para simplificar esta última ecuación usamos las siguientes propiedades

$$u_{\mathbf{k}, \alpha \beta} = u_{\mathbf{k}} \delta_{\alpha \beta}, \quad v_{\mathbf{k}, \alpha \beta} = -v_{-\mathbf{k}} \delta_{\beta \alpha}, \quad (97)$$

$$\langle d_{-\mathbf{k}, \alpha} d_{\mathbf{k}, \beta} \rangle = \langle d_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} d_{-\mathbf{k}, \beta}^{\dagger} \rangle = 0, \quad (98)$$

y

$$\langle d_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} d_{\mathbf{k}, \beta} \rangle = \delta_{\alpha \beta} - \langle d_{\mathbf{k}, \beta} d_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} \rangle = f_{\mathbf{k}} \delta_{\alpha \beta}, \quad (99)$$



## Simetrías del Estado Superconductor

donde hemos considerado que el número de excitaciones  $\langle d_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger d_{\mathbf{k},\alpha} \rangle$  obedece a la estadística de Fermi-Dirac

$$f_{\mathbf{k}} = f(E_\eta(\mathbf{k})) = \frac{1}{e^{\frac{E_\eta(\mathbf{k})}{k_B T}} + 1}. \quad (100)$$

Así obtenemos que

$$F_{\lambda\mu}(\mathbf{k}) = -u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k},\lambda\mu}(1 - 2f_{\mathbf{k}}) = \frac{\tilde{\Delta}_{\lambda\mu}(\mathbf{k})}{2E_\eta(\mathbf{k})}(1 - 2f_{\mathbf{k}}). \quad (101)$$

Después de sustituir el resultado anterior en la Ec. (74), llegamos finalmente a la ecuación de autoconsistencia para la brecha superconductor

$$\tilde{\Delta}_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}',\lambda,\mu} V_{\beta\alpha,\lambda\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\tilde{\Delta}_{\lambda\mu}(\mathbf{k}')}{2E_\eta(\mathbf{k}')} (1 - 2f_{\mathbf{k}'}). \quad (102)$$

Para el caso singulete

$$\Delta^{(1)}(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} V^{(e)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{(1 - 2f_{\mathbf{k}'})}{2\sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + \Delta_\eta^2 |g(\mathbf{k}')|^2}} \Delta^{(1)}(\mathbf{k}'), \quad (103)$$

donde  $\eta = s^*, d$ , mientras que para el caso triplete

$$\Delta^{(3)}(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} V^{(o)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{(1 - 2f_{\mathbf{k}'})}{2\sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + \Delta_\eta^2 |\mathbf{P}(\mathbf{k}')|^2}} \Delta^{(3)}(\mathbf{k}') \quad (104)$$

con  $\eta = p$ . En ambos casos usamos la definición  $\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu$ .

En resumen, hemos encontrado la ecuación que determine la brecha superconductor con espín triplete [Ec. (104)], la cual puede reescribirse para un potencial de interacción arbitrara  $[V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] ]$  como

$$\Delta^{(3)}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}'} [V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - V(\mathbf{k}, -\mathbf{k}') - V(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') + V(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}')] \frac{\Delta^{(3)}(\mathbf{k}')}{2E_p(\mathbf{k}')} (1 - 2f_{\mathbf{k}'}). \quad (105)$$

Esta última ecuación será nuestro punto de partida para el análisis del estado superconductor con espín triplete.

### 3.3 Simetrías del Estado Superconductor

## Simetrías del Estado Superconductor

### 3.3.1. Simetría $p$

Aplicando al potencial de Hubbard  $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}',0}$  cuyos pares tienen centro de masa en reposo ( $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ ), es decir,  $\frac{1}{2}V(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{1}{N_S}W_{\mathbf{k},\mathbf{k}',0}$ , la Ec. (105) puede reescribirse como

$$\begin{aligned}\Delta^{(3)}(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{2N_S} \sum_{\mathbf{k}'} (W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} - W_{-\mathbf{k},\mathbf{k}'} + W_{-\mathbf{k},-\mathbf{k}'}) \frac{\Delta^{(3)}(\mathbf{k}')}{2E_p(\mathbf{k}')} \tanh \frac{E_p(\mathbf{k}')}{2k_B T} \\ &= -\frac{1}{N_S} \sum_{\mathbf{k}'} (W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}) \frac{\Delta^{(3)}(\mathbf{k}')}{2E_p(\mathbf{k}')} \tanh \frac{E_p(\mathbf{k}')}{2k_B T}\end{aligned}\quad (106)$$

donde se ha utilizado las propiedades  $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = W_{-\mathbf{k},-\mathbf{k}'}$  y  $W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} = W_{-\mathbf{k},\mathbf{k}'}$  para el caso particular de la Ec. (171).

Si consideramos una distorsión de los ángulos rectos de la red cuadrada, entonces el potencial  $W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$  toma una forma específica que está dada por la Ec. (171) y en consecuencia la Ec. (106) se convierte en

$$\begin{aligned}\Delta^{(3)}(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{2N_S} \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ \frac{V}{2} \beta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - \frac{V}{2} \beta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') + 2\Delta t_3^+ [\cos(k_x a + k'_y a) - \right. \\ &\quad \left. \cos(k_x a - k'_y a) + \cos(k'_x a + k_y a) - \cos(-k'_x a + k_y a)] \right. \\ &\quad \left. - 2\Delta t_3^- [\cos(k_x a + k'_y a) - \cos(k_x a - k'_y a) + \cos(-k'_x a - k_y a) - \right. \\ &\quad \left. \cos(k'_x a - k_y a)] \right\} \frac{\Delta^{(3)}(\mathbf{k}')}{E_p(\mathbf{k}')} \tanh \frac{E_p(\mathbf{k}')}{2k_B T}.\end{aligned}\quad (107)$$

Para simplificar esta expresión utilizamos las identidades trigonométricas

$$\cos \alpha + \cos \beta = 2 \cos \frac{\alpha + \beta}{2} \cos \frac{\alpha - \beta}{2}, \quad (108)$$

$$\cos \alpha - \cos \beta = -2 \sin \frac{\alpha + \beta}{2} \sin \frac{\alpha - \beta}{2}, \quad (109)$$

es decir

$$\begin{aligned}&\cos(k_x a + k'_y a) - \cos(k_x a - k'_y a) + \\ &\cos(k'_x a + k_y a) - \cos(-k'_x a + k_y a) \\ &= -2 \sin(k_x a) \sin(k'_y a) - 2 \sin(k_y a) \sin(k'_x a),\end{aligned}\quad (110)$$

## Simetrías del Estado Superconductor

por lo tanto, la Ec. (107) se reduce a

$$\Delta^{(3)}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2N_S} \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ \frac{V}{2} [\beta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - \beta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')] - 4(\Delta t_3^+ - \Delta t_3^-) \times \right. \\ \left. [\sin(k_x a) \sin(k'_y a) + \sin(k'_x a) \sin(k_y a)] \right\} \frac{\Delta^{(3)}(\mathbf{k}')}{E_p(\mathbf{k}')} \tanh \frac{E_p(\mathbf{k}')}{2k_B T} \quad (111)$$

Dado que  $\delta_3 = (\Delta t_3^+ - \Delta t_3^-)/2$ , proponiendo la brecha energética tipo  $p$  de la siguiente forma

$$\Delta^{(3)}(\mathbf{k}) = \Delta_p [\sin(k_x a) \pm \sin(k_y a)] \hat{\mathbf{k}}_z \quad (112)$$

y sustituyendo la expresión de  $\beta(\mathbf{k})$  [Ec. (22)] en la Ec. (111), esta última se transforma a

$$\Delta_p g(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{k}}_z = -\frac{1}{2N_S} \left[ \sum_{\mathbf{k}'} V \cos(k_x a - k'_x a) + V \cos(k_y a - k'_y a) - \right. \\ \left. V \cos(k_x a + k'_x a) - V \cos(k_y a + k'_y a) - 8\delta_3 \sin(k_x a) \sin(k'_y a) \right. \\ \left. + 8\delta_3 \sin(k'_x a) \sin(k_y a) \right] \times \frac{\Delta_p g(\mathbf{k}') \hat{\mathbf{k}}'_z}{E_p(\mathbf{k}')} \tanh \frac{E_p(\mathbf{k}')}{2k_B T} \quad (113)$$

donde  $g(\mathbf{k}) = [\sin(k_x a) \pm \sin(k_y a)]$ . Como  $\hat{\mathbf{k}}_z$  y  $\hat{\mathbf{k}}'_z$  son vectores unitarios perpendiculares a la red cuadrada, entonces son iguales. La Ec (113) puede reescribirse como

$$\Delta_p g(\mathbf{k}) = -\Delta_p \sin(k_x a) \frac{V}{N_S} \sum_{\mathbf{k}'} [\sin^2(k'_x a) \pm \sin(k'_x a) \sin(k'_y a)] F(\mathbf{k}') \\ \mp \Delta_p \sin(k_y a) \frac{V}{N_S} \sum_{\mathbf{k}'} [\sin^2(k'_y a) \pm \sin(k'_x a) \sin(k'_y a)] F(\mathbf{k}') \\ \pm \Delta_p \sin(k_x a) \frac{4\delta_3}{N_S} \sum_{\mathbf{k}'} [\sin^2(k'_y a) \pm \sin(k'_x a) \sin(k'_y a)] F(\mathbf{k}') \\ + \Delta_p \sin(k_y a) \frac{4\delta_3}{N_S} \sum_{\mathbf{k}'} [\sin^2(k'_x a) \pm \sin(k'_x a) \sin(k'_y a)] F(\mathbf{k}'), \quad (114)$$

## Simetrías del Estado Superconductor

donde  $F(\mathbf{k}') = \frac{1}{E_p(\mathbf{k}')} \tanh \frac{E_p(\mathbf{k}')}{2k_B T}$  es una función invariante ante intercambio de  $\mathbf{k}'_x$  y  $\mathbf{k}'_y$ , por lo tanto,

$$\Delta_p g(\mathbf{k}) = - \left[ \left( \frac{V}{N_S} \mp \frac{4\delta_3}{N_S} \right) \Delta_p \sin(k_x a) \pm \Delta_p \sin(k_y a) \left( \frac{V}{N_S} \mp \frac{4\delta_3}{N_S} \right) \right] \times \sum_{\mathbf{k}'} [\sin^2(k'_x a) \pm \sin(k'_x a) \sin(k'_y a)] F(\mathbf{k}'). \quad (115)$$

Finalmente, obtenemos

$$1 = - \frac{(V \mp 4\delta_3)}{N_S} \sum_{\mathbf{k}} [\sin^2(k_x a) \pm \sin(k_x a) \sin(k_y a)] \frac{1}{E_p(\mathbf{k})} \tanh \frac{E_p(\mathbf{k})}{2k_B T}, \quad (116)$$

donde

$$E_p(\mathbf{k}) = \sqrt{[\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu]^2 + \Delta_p^2 [\sin(k_x a) \pm \sin(k_y a)]^2}, \quad (117)$$

siendo  $\varepsilon_0(\mathbf{k})$  la energía de una sola partícula [Ec. (175)], la cual dentro de la aproximación de campo medio puede escribirse como

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \left( \frac{U}{2} + 4V \right) n + 2(t_0 + n\Delta t) [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 2(t'_+ + 2n\Delta t'_3) \cos(k_x a + k_y a) + 2(t'_- + 2n\Delta t'_3) \cos(k_x a - k_y a). \quad (118)$$

Por otro lado, para sistemas de muchas partículas interactuantes, la estructura de bandas en el esquema de una sola partícula depende de la intensidad de la interacción. En consecuencia, el potencial químico cambia su valor y para temperaturas finitas -tomando en cuenta la estadística de Fermi-Dirac- la Ec. (58) se convierte en

$$n - 1 = - \frac{1}{N_S} \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu|}{E_p(\mathbf{k})} \tanh \frac{E_p(\mathbf{k})}{2k_B T}. \quad (119)$$

Hasta el momento hemos analizado los dos estados de espín paralelo del estado superconductor con espín triplete, a continuación investigaremos el caso triplete con espines antiparalelos. Para ello, consideremos la parte antisimétrica del potencial de la Ec. (170),

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{(o)} = \frac{1}{4} (V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - V_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} - V_{-\mathbf{k},\mathbf{k}'} + V_{-\mathbf{k},-\mathbf{k}'}), \quad (120)$$

## Simetrías del Estado Superconductor

y utilizando las propiedades  $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = V_{-\mathbf{k},-\mathbf{k}'}$  y  $V_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'} = V_{-\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ , obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - V_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}) &= \frac{V}{2} \beta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - \frac{V}{2} \beta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') + \\ &\Delta t [\beta(\mathbf{k}) + \beta(\mathbf{k}') - \beta(-\mathbf{k}) - \beta(-\mathbf{k}')] + \\ &\Delta t_3^+ [\gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - \gamma(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')] + \Delta t_3^- [\zeta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - \zeta(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')]. \end{aligned} \quad (121)$$

Sustituyendo esta expresión en la Ec. (106) en el lugar de  $\frac{1}{2}(W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'})$  pero usando la misma simetría de la brecha energética superconductor [Ec. (112)], obtenemos

$$\begin{aligned} \Delta_p g(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{k}}_z &= -\frac{\Delta_p}{2N_S} \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ \left[ \frac{1}{2} (U - U) \right] g(\mathbf{k}') + \left[ \frac{V}{2} \beta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - \frac{V}{2} \beta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \right] g(\mathbf{k}') \right. \\ &+ 2\Delta t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k'_x a) + \cos(k'_y a) - \\ &\cos(k_x a) - \cos(k_y a) - \cos(k'_x a) - \cos(k'_y a)] g(\mathbf{k}') + \\ &2\Delta t_3^+ [\cos(k_x a + k'_y a) - \cos(k_x a - k'_y a) + \cos(k'_x a + k_y a) - \\ &\cos(-k'_x a + k_y a)] g(\mathbf{k}') - 2\Delta t_3^- [\cos(k_x a + k'_y a) - \cos(k_x a - k'_y a) \\ &\left. + \cos(-k'_x a - k_y a) - \cos(k'_x a - k_y a)] g(\mathbf{k}') \right\} \hat{\mathbf{k}}'_z F(\mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (122)$$

Simplificando la ecuación (122) anterior observamos que ésta se reduce precisamente a la ecuación (107). De este modo, obtenemos que para el caso triplete de espines antiparalelos se obtiene la misma ecuación de la brecha energética superconductor [Ecs. (116)] que el caso de espines paralelos. En consecuencia, los tres estados de espín triplete [Ecs. (28)] pueden ser descritos por las mismas ecuaciones [Mineev, *et al.*, 1999].

En la siguiente sección analizaremos las ecuaciones del estado superconductor para las simetrías  $s^*$  y  $d$ .

### 3.3.2. Simetrías $s^*$ y $d$

Como hemos visto, el hamiltoniano de Hubbard generalizado a segundos vecinos nos permite, al pasar del espacio real al espacio recíproco la Ec. (14), encontrar de manera natural los potenciales de interacción entre partículas con espines antiparalelos y paralelos. El desarrollo anterior para el canal  $p$  puede realizarse de manera similar para las simetrías  $s^*$  y  $d$ .

Es sencillo mostrar que tomando en consideración la asimetría  $\Delta t_3^\pm$  en las direcciones  $\mathbf{x} \pm \mathbf{y}$  respectivamente, las ecuaciones acopladas para las simetrías  $s^*$  y  $d$ , no cambian [Pérez, *et al.*, 2002], viéndose reflejada la dependencia de  $\delta_3$  en la

## Simetrías del Estado Superconductor

relación de dispersión de campo medio [Ec. (118)], la cual a su vez es invariante ante cualquier tipo de simetría superconductor. Para el caso de simetría  $s^*$ , consideramos la brecha energética [Hirsch, *et al.*, 1989] de la forma

$$\Delta_{s^*}(\mathbf{k}) = \Delta_s + \Delta_{s^*} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \quad (123)$$

y el potencial de espines antiparalelos [Ec.(170)]. Así el conjunto de ecuaciones acopladas son

$$\Delta_{s^*} = -(V + 4\Delta t_3) (I_2 \Delta_{s^*} + I_1 \Delta_s) - 4\Delta t (I_1 \Delta_{s^*} + I_0 \Delta_s), \quad (124)$$

y

$$\Delta_s = -U (I_1 \Delta_{s^*} + I_0 \Delta_s) - 4\Delta t (I_2 \Delta_{s^*} + I_1 \Delta_s), \quad (125)$$

donde

$$I_l = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]^l}{2E_{s^*}} \tanh\left(\frac{E_{s^*}(\mathbf{k})}{2k_B T_c}\right), \quad (126)$$

siendo  $N_s$  el número total de sitios,

$$E_{s^*}(\mathbf{k}) = \sqrt{(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta_{s^*}^2(\mathbf{k})}, \quad (127)$$

y  $\varepsilon_0(\mathbf{k})$  está dada por la Ec. (118). De esta forma, las Ecs. (124), (125) junto con la siguiente ecuación que determina el potencial químico

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E_{s^*}(\mathbf{k})} \tanh\left(\frac{E_{s^*}(\mathbf{k})}{2k_B T_c}\right), \quad (128)$$

forman un sistema de tres ecuaciones acopladas para el canal  $s^*$ . Adicionalmente, la condición de transición superconductor  $\Delta_{s^*}(T_c) = 0$  lleva a las ecuaciones (124) y (125) a la ecuación

$$1 = -UI_0 - \beta I_2 - 2\lambda I_1 - (\beta U - \lambda^2)(I_0 I_2 - I_1^2) \quad (129)$$

donde  $\beta = V + 4\Delta t_3$  y  $\lambda = 4\Delta t$ . Por ello, para el cálculo de  $T_c$  en el canal  $s^*$  solo es necesario resolver dos ecuaciones acopladas [Ecs. (129) y (128)].

El caso similar al propuesto en el modelo BCS es aquel que tiene los siguientes valores de parámetros:  $t = -1$ ,  $t' = V = \Delta t = \Delta t_3 = 0$  y  $U < 0$ , el cual corresponde a una brecha energética con simetría esférica  $s$  que no depende del vector de onda  $\mathbf{k}$ .

Por otra parte, en las ecuaciones acopladas correspondientes a la simetría  $d$ , se propone la siguiente expresión para la brecha energética [Pérez, *et al.*, 2002]

$$\Delta_d(\mathbf{k}) = \Delta_d [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]. \quad (130)$$

## Simetrías del Estado Superconductor

En este caso la ecuación de la brecha energética para la simetría  $d$  es

$$1 = -\frac{(V \mp 4\Delta t_3)}{N_S} \sum_{\mathbf{k}} [\cos^2(k_x a) - \cos(k_x a) \cos(k_y a)] \frac{1}{E_d(\mathbf{k})} \tanh \frac{E_d(\mathbf{k})}{2k_B T}, \quad (131)$$

la cual deberá resolverse simultáneamente con la siguiente ecuación

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E_d(\mathbf{k})} \tanh \left( \frac{E_d(\mathbf{k})}{2k_B T_c} \right). \quad (132)$$

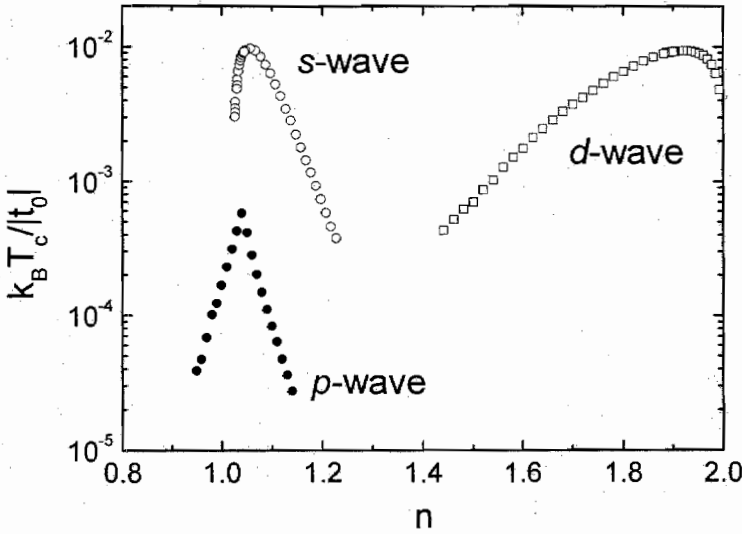


Figura 4.2.1 Temperatura crítica del canal  $s^*$  (círculos abiertos),  $p$  (círculos sólidos) y  $d$  (cuadrados abiertos) como función de la densidad de electrones ( $n$ ), para el sistema  $t'_0 = -0.45|t_0|$ ,  $U = 8|t_0|$ ,

$$V = \delta = 0, \Delta t = 0.5|t_0|, \Delta t_3 = 0.05|t_0| \text{ y } \delta_3 = 0.05|t_0|.$$

Es interesante enfatizar que las ecuaciones (116) y (131) son **iguales**, excepto que  $\Delta t_3$  y  $[\cos^2(k_x a) - \cos(k_x a) \cos(k_y a)]$  son para la superconductividad con simetría  $d$ , mientras  $\delta_3$  y  $[\sin^2(k_x a) \pm \sin(k_x a) \sin(k_y a)]$  para la simetría  $p$  [Pérez, *et al.*, 2005]. Así mismo, se puede observar que las ecuaciones que determinan la superconductividad con simetría  $s^*$  también son muy similares. Esta simetría entre las ecuaciones para  $s^*$ ,  $p$  y  $d$ , nos brinda la posibilidad de formular una teoría unificada para la superconductividad anisotrópica.

## *Simetrías del Estado Superconductor*

Como un ejemplo de la competencia entre los tres tipos de simetría estudiados anteriormente, resolvimos las ecuaciones correspondientes en cada caso y obtuvimos las curvas que se exponen en la figura 4.2.1, en la cual podemos observar el comportamiento de la  $T_c$  con la densidad electrónica ( $n$ ), para los valores de parámetros  $t'_0 = -0.45 |t_0|$ ,  $U = 8 |t_0|$ ,  $V = \delta = 0$ ,  $\Delta t = 0.5 |t_0|$ ,  $\Delta t_3 = 0.05 |t_0|$  y  $\delta_3 = 0.05 |t_0|$ .

Nótese que para cada curva existe un valor óptimo de la densidad electrónica ( $n_{op}$ ) para la  $T_c$  es máxima, a pesar de que se localiza en valores diferentes de  $n$ . En particular, los valores de  $n_{op}$  para las simetrías  $p$  y  $d$  se encuentran en la región de electrones y la de huecos, respectivamente. Este hecho concuerda con lo observado experimentalmente en  $Sr_2RuO_4$  y en los óxidos superconductores de alta  $T_c$ .

En el próximo capítulo estudiaremos con más detalle las propiedades del estado superconductor con simetría  $p$ , el cual constituye el tema central de esta tesis.



## Capítulo 4

# Superconductividad Triplete

En este capítulo se presentarán primeramente una solución analítica del estado superconductor con simetría  $p$  para el límite diluido y fuertemente correlacionado, dentro del modelo de Hubbard en una red cuadrada con distorsión infinitesimal. En la segunda sección se presentará un método alternativo para determinar el potencial químico del estado superconductor. Por último, se presentarán las principales propiedades de la superconductividad con espín triplete, tales como  $T_c$ ,  $\Delta_0/2k_B T_c$ , así como la variación angular del espectro de excitación.

### 4.1 Límite Fuertemente Correlacionado

Una de las mayores expectativas de los trabajos teóricos en el tema de la superconductividad es encontrar una solución analítica del estado superconductor, sin embargo si ésta existe no debe ser trivial. En esta sección mostraremos una solución analítica de las ecuaciones (116) y (119) para obtener el valor de la brecha energética ( $\Delta_p$ ), la temperatura crítica ( $T_c$ ) y la razón de la brecha energética ( $2\Delta_0/k_B T_c$ ), en el límite diluido ( $n \rightarrow 0$ ) y fuertemente correlacionado [ $\varepsilon_0(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ ].

Partiremos de la serie de Taylor de  $E_p(\mathbf{k})$  para  $\Delta_p \ll 1$ , esto es

$$\begin{aligned}
 E_p(\mathbf{k}) &= \sqrt{[\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu]^2 + \Delta_p^2 [\sin(k_x a) \pm \sin(k_y a)]^2} \\
 &\simeq |\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu| \left\{ 1 + \frac{\Delta_p^2 [\sin(k_x a) \pm \sin(k_y a)]^2}{2[\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu]^2} \right\}.
 \end{aligned} \tag{133}$$

Usando la propiedad  $1/(1+x) \simeq 1-x$  se tiene que

$$\frac{1}{E_p(\mathbf{k})} \simeq \frac{1}{|\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu|} \left\{ 1 - \frac{\Delta_p^2 [\sin(k_x a) \pm \sin(k_y a)]^2}{2[\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu]^2} \right\}. \tag{134}$$

## Límite Fuertemente Correlacionado

Entonces, cuando  $T = 0$  y en el límite fuertemente correlacionado [ $\varepsilon_0(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ ], la ecuación (119) puede reescribirse como

$$\begin{aligned} n - 1 &\simeq - \left( \frac{a}{2\pi} \right)^2 \iint_{1BZ} \frac{[\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu]}{|\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu|} \left\{ 1 - \frac{\Delta_p^2 [\sin(k_x a) \pm \sin(k_y a)]^2}{2[\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu]^2} \right\} dk_x dk_y \\ &\simeq \text{signo}(\mu) \left( 1 - \frac{\Delta_p^2}{2\mu^2} \right). \end{aligned} \quad (135)$$

En la ausencia de interacciones electrón-electrón, el límite  $\varepsilon_0(\mathbf{k}) \rightarrow 0$  implica que  $\mu \rightarrow 0$ . Entonces, cuando se enciende la interacción atractiva, se propician la formación de pares y la condensación superconductor, por lo que se espera un potencial químico ( $\mu$ ) del estado superconductor negativo. De la Ec. (135) y considerando  $\mu < 0$ , se tiene que

$$\mu = - \frac{\Delta_p}{\sqrt{2n}}. \quad (136)$$

Utilizando el desarrollo de Taylor de  $E_p(\mathbf{k})$  [Ec. (134)], la Ec. (116) se transforma a

$$\begin{aligned} 1 &= - (V \mp 4\delta_3) \left( \frac{a}{2\pi} \right)^2 \iint_{1BZ} \frac{\sin^2(k_x a) \pm \sin(k_x a) \sin(k_y a)}{[\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu]} \times \\ &\quad \left( 1 - \frac{\Delta_p^2 [\sin(k_x a) \pm \sin(k_y a)]^2}{2[\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu]^2} \right) dk_x dk_y. \end{aligned} \quad (137)$$

Para el caso de  $V = 0$  y  $\varepsilon_0(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ , obtenemos

$$\begin{aligned} 1 &= \mp \delta_3 \left( \frac{a}{2\pi} \right)^2 \iint_{1BZ} \frac{\sin^2(k_x a) \pm \sin(k_x a) \sin(k_y a)}{\mu} \times \\ &\quad \left( 1 - \frac{\Delta_p^2 [\sin(k_x a) \pm \sin(k_y a)]^2}{2\mu^2} \right) dk_x dk_y. \end{aligned} \quad (138)$$

Nótese que los signos  $\pm$  en la última ecuación se derivan de la orientación de la distorsión, sin embargo, ambos casos conducen a un mismo valor de la brecha superconductor para una  $|\delta_3|$  dada, por lo que analizaremos únicamente el caso del signo superior. Evaluando las integrales de la Ec. (138) obtenemos

$$1 = - \frac{2\delta_3}{\mu} \left( 1 - \frac{9}{4} \frac{\Delta_p^2}{2\mu^2} \right). \quad (139)$$

## Límite Fuertemente Correlacionado

Sustituyendo la expresión de  $\mu$  dada en la Ec (136), se obtiene

$$\frac{\Delta_p}{\delta_3} = 2\sqrt{2n} \left(1 - \frac{9n}{4}\right). \quad (140)$$

Por otro lado, en el caso de  $T = T_c$ , se tiene que  $\Delta_p(T_c) = 0$  y la ecuación (119) toma la forma

$$n - 1 = - \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \iint_{1BZ} \frac{(\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu)}{|\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu|} \tanh \frac{|\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu|}{2k_B T_c} dk_x dk_y. \quad (141)$$

Considerando  $\varepsilon_0(\mathbf{k}) \rightarrow 0$  obtenemos que

$$\begin{aligned} n - 1 &= \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \iint_{1BZ} \tanh \frac{|\mu|}{2k_B T_c} dk_x dk_y \\ &= \tanh \frac{|\mu|}{2k_B T_c}, \end{aligned} \quad (142)$$

y entonces

$$|\mu| = 2k_B T_c \tanh^{-1}(1 - n). \quad (143)$$

Para encontrar la expresión de  $T_c$ , partimos nuevamente de la Ec. (116) con  $\Delta_p(T_c) = 0$ , por lo cual

$$1 = -(V \mp \delta_3) \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \iint_{1BZ} \frac{\sin^2(k_x a) \pm \sin(k_x a) \sin(k_y a)}{|\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu|} \tanh \frac{|\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu|}{2k_B T_c} dk_x dk_y, \quad (144)$$

y tomando  $\varepsilon_0(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ , obtenemos

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{\delta_3}{|-\mu|} \tanh \frac{|\mu|}{2k_B T_c} \left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \iint_{1BZ} [\sin^2(k_x a) + \sin(k_x a) \sin(k_y a)] dk_x dk_y \\ &= \frac{\delta_3}{|\mu|} \tanh \frac{|\mu|}{2k_B T_c}. \end{aligned} \quad (145)$$

Finalmente, usando la Ec. (143) encontramos que

$$\frac{k_B T_c}{\delta_3} = \frac{(1 - n)}{\tanh^{-1}(1 - n)}. \quad (146)$$

Por último, analizaremos la energía de excitación de las cuasi-partículas ( $\Delta_0$ ), la cual se define como el valor mínimo de  $E_p(\mathbf{k})$  [Ec. (117)] evaluada en el antinodo [Monthoux, *et al*, 1994]. Así mismo, mostraremos una expresión del cociente

## Límite Fuertemente Correlacionado

$2\Delta_0/k_B T_c$  en el límite fuertemente correlacionado [ $\varepsilon_0(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ ]. En dicho límite la Ec. (117) puede expresarse como

$$E_p(\mathbf{k}) = \sqrt{[8n\delta_3 \sin(k_x a) \sin(k_y a) - \mu]^2 + \Delta_p^2 [\sin(k_x a) + \sin(k_y a)]^2}. \quad (147)$$

El mínimo de esta ecuación en la dirección antinodal se encuentra en  $(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a})$ , por lo cual

$$E_p\left(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\right) = \sqrt{(8n\delta_3 - \mu)^2 + 4\Delta_p^2} \quad (148)$$

y sustituyendo la Ec. (136) en la expresión anterior, obtenemos que

$$\Delta_0 = E_p\left(\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\right) = \sqrt{\left(8n\delta_3 - \frac{\Delta_p}{\sqrt{2n}}\right)^2 + 4\Delta_p^2}. \quad (149)$$

Ahora sustituimos la Ec (140) en esta última expresión, obtenemos

$$\begin{aligned} \Delta_0 &= \sqrt{\left[8n\delta_3 - \frac{2\sqrt{2n}\delta_3\left(1 - \frac{9n}{4}\right)}{\sqrt{2n}}\right]^2 + 4\left[2\sqrt{2n}\delta_3\left(1 - \frac{9n}{4}\right)\right]^2} \\ &\simeq 2\delta_3\left(1 - \frac{9n}{4}\right). \end{aligned} \quad (150)$$

Para encontrar el cociente  $2\Delta_0/k_B T_c$ , usamos las Ecs. (150) y (146), por lo cual

$$\frac{2\Delta_0}{k_B T_c} = \frac{2 \ln\left(\frac{2-n}{n}\right)}{(1-n)} \left(1 - \frac{9n}{4}\right), \quad (151)$$

donde hemos usado la expresión  $\tanh^{-1}(z) = \frac{1}{2} \ln[(1+z)/(1-z)]$ .

Hasta aquí hemos visto que existe una solución analítica que describe el estado superconductor con espín triplete en el límite diluido y fuertemente correlacionado. Con el propósito de estimar el grado de precisión de las soluciones numéricas del sistema de ecuaciones acopladas (116) y (119), mostramos en las figuras 4.1.1(a), (b) y (c) las graficas -líneas punteadas- de las funciones  $\Delta_p$  [Ec. (140)],  $T_c$  [Ec. (151)] y  $2\Delta_0/k_B T_c$  [Ec. (151)], respectivamente, así como las correspondientes soluciones numéricas -círculos abiertos- de un sistema con valores de parámetros  $t_0 = t'_0 = \Delta t = \Delta t_3 = \delta' = U = V = 0$ .

Además, podemos notar que  $2\Delta_0/k_B T_c$  en el límite diluido y fuertemente correlacionado es independiente de los parámetros. De hecho, observamos en la figura 4.1.1.(c) que en el límite de bajas densidades,  $2\Delta_0/k_B T_c$  alcanza valores muy altos comparados con 3.57 que fue predicho por la teoría BCS y decrece cuando la densidad de electrones se incrementa. Por otro lado, es importante enfatizar la

## Determinación del Potencial Químico

universalidad de las ecuaciones (140), (146) y (151).

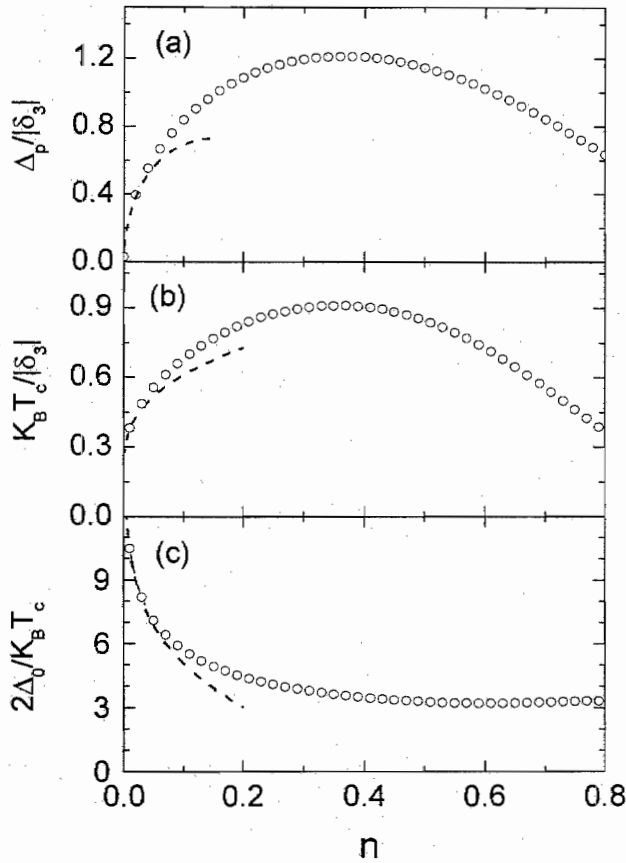


Figura 4.1.1. Resultados numéricos (círculos abiertos) de (a) la brecha superconductora del canal- $p$  ( $\Delta_p$ ), (b) temperatura crítica ( $T_c$ ) y (c) razón de la brecha energética [ $2\Delta_0/(k_B T_c)$ ] contra la concentración de electrones ( $n$ ), con  $\delta_3 \neq 0$  y los otros parámetros del hamiltoniano igual a cero, en comparación con las soluciones analíticas (líneas punteadas), válido para  $n \rightarrow 0$ .

## 4.2 Determinación del Potencial Químico

Las ecuaciones (116) y (119) se deben resolver simultáneamente para determinar el potencial químico ( $\mu$ ) y la brecha energética superconductora ( $\Delta_p$ ) o en su caso la temperatura crítica ( $T_c$ ). Dada la naturaleza trascendental de estas ecuaciones

## Determinación del Potencial Químico

hemos empleado el método autoconsistente para resolverlas, el cual consiste en evaluar una solución inicial propuesta y las ecuaciones generan nuevas soluciones de siguiente generación hasta que se cumpla un criterio de convergencia. Sin embargo, este proceso aplicado a ecuaciones simultáneas que involucran integrales múltiples resulta ser extremadamente costoso en tiempo de cómputo, típicamente se requiere de 72 horas para encontrar una  $T_c$  del orden de 100K utilizando una Compaq AlphaServer SC45. Además, dicho tiempo aumenta exponencialmente cuando decrece  $T_c$ , es decir, con la capacidad de cómputo actual resultaría prácticamente imposible encontrar una solución con  $T_c \simeq 1.5K$  observada en  $Sr_2RuO_4$ . Cabe mencionar que este problema es común en teorías desarrolladas dentro del formalismo BCS generalizado que considera  $\mu$  como una variable que debe determinarse simultáneamente con otros parámetros del estado superconductor. Esta dificultad nos ha obligado a buscar un método alternativo para disminuir significativamente el consumo de tiempo de cómputo. Hemos encontrado numéricamente que el potencial químico obtenido de la densidad de estados de una partícula  $[D(\epsilon)]$  -en la aproximación de campo medio- se acerca al correspondiente valor de  $\mu$  obtenido de las ecuaciones simultáneas, como se apreciará en la figura 4.3.1. Pensamos que dicho método funciona con precisión necesaria puesto que  $T_c$  pequeñas corresponden al régimen de interacciones débiles, como se muestra a continuación para el caso de simetría  $s$ . A  $T = 0$ , el número total de electrones ( $N$ ) puede escribirse como

$$N = \int_{-\infty}^{E_F} D(\epsilon) d\epsilon, \quad (152)$$

donde  $E_F$  es la energía de Fermi en el esquema de una partícula y dentro de la aproximación de campo medio. Por otra parte, el valor de expectación del número de partículas en el estado superconductor esta dada por [Rickayzen, 1966]

$$N = \langle \Psi_A | \hat{N} | \Psi_A \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} v_{\mathbf{k}}^2, \quad (153)$$

y usando la Ec. (55)

$$v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E_s(\mathbf{k})} \right], \quad (154)$$

obtenemos

$$N = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[ 1 - \frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \mu}{\sqrt{(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta_s^2}} \right]. \quad (155)$$

## *Superconductividad con simetría $p$*

Reescribiendo la ecuación (155) como una integral en el espacio de energía, se tiene que

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{D(\epsilon)}{2} \left[ 1 - \frac{\epsilon - \mu}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta_s^2}} \right]. \quad (156)$$

Integrando por partes obtenemos

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \left[ \int_{-\infty}^{\epsilon} d\epsilon' D(\epsilon') \right] \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \frac{\epsilon - \mu}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta_s^2}}. \quad (157)$$

Dado que

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \frac{\epsilon - \mu}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + |\Delta_s|^2}} = \frac{\Delta_s^2}{2 [(\epsilon - \mu)^2 + \Delta_s^2]^{\frac{3}{2}}},$$

se asemeja a una función Lorentziana y usando la expansión de Sommerfeld [Ashcroft, 1976] se tiene que

$$N = \left[ \int_{-\infty}^{\mu} d\epsilon' D(\epsilon') \right] + O(\Delta_s / |\mu|)^2. \quad (158)$$

Como  $\Delta_s \ll |\mu|$  y la densidad de estados en el intervalo entre  $\mu$  y  $E_F$  tiene poca variación, se tiene que [Marder, 2000]

$$N \simeq \int_{-\infty}^{\mu} d\epsilon' D(\epsilon') \simeq N + D(E_F)(\mu - E_F), \quad (159)$$

por lo tanto

$$\mu \simeq E_F. \quad (160)$$

En otras palabras, el potencial químico del estado superconductor se puede estimar a partir de la energía de Fermi de una sola partícula dentro de la aproximación de campo medio, hecho que fue confirmado numéricamente en nuestros cálculos. En la siguiente sección, mostraremos las principales características del estado superconductor con espín triplete y simetría espacial  $p$  dentro del modelo de Hubbard generalizado.

### 4.3 Superconductividad con simetría $p$

En esta sección se presentan los principales resultados que hemos obtenido en el estudio de la superconductividad con simetría  $p$ . Estos resultados son obtenidos

empleando el método discutido en la sección anterior que permite cuantificar el potencial químico y reducir dos ecuaciones integrales acopladas a una sola. Por ser ecuaciones trascendentales utilizamos el método de Newton-Raphson para encontrar la solución. Así mismo, las integrales sobre la primera zona de Brillouin se realizan utilizando el método de Simpson con paso variable y se requiere de una partición del orden de  $10^9$  para un criterio de convergencia de  $10^{-6}$  y  $T_c \sim 10K$ . Todos los cálculos numéricos se han realizado en doble precisión y algunos de ellos fueron verificados empleando cuádruple precisión.

### 4.3.1. Temperatura Crítica

La condición de la transición del estado normal al superconductor está determinado por  $\Delta_p(T_c) = 0$ . Los resultados de estos cálculos se muestran en la figura 4.3.1 para los valores de  $V = \Delta t_0 = \Delta t_3 = \delta' = 0$ ,  $t'_0 = -0.3|t_0|$  y  $\delta_3 = 0.5|t_0|$ , (cuadrados),  $0.375|t_0|$  (círculos),  $0.25|t_0|$  (triángulos hacia arriba),  $0.2|t_0|$  (triángulos hacia abajo) y  $0.125|t_0|$  (rombos), en comparación con las soluciones de las ecuaciones acopladas (116) y (119) indicadas por líneas sólidas para los casos de  $\delta_3 = 0.5$  y  $0.375|t_0|$ . Como se puede observar, el método que desacopla las ecuaciones mencionadas anteriormente estima correctamente el potencial químico del estado superconductor, ya que conduce prácticamente a los mismos resultados obtenidos a partir de las dos ecuaciones acopladas.

Nótese el cambio de hasta cuatro órdenes de magnitud en  $T_c$  para un rango angosto de la densidad de electrónica. En el recuadro de la Figura 4.3.1, la  $T_c$  del estado superconductor de los canales  $p$  y  $d$  con  $n = 0.61$  ( $n = 0.5$ ) como una función de  $\Delta t_3$  son respectivamente exhibidas como círculos negros (grises) abiertos y sólidos para  $\delta_3 = 0.375|t_0|$ , también como triángulos negros (grises) abiertos y sólidos para  $\delta_3 = 0.2|t_0|$ . Obsérvese que para grandes valores de  $\Delta t_3$  la superconductividad con simetría  $p$  es suprimida por el estado superconductor con simetría  $d$ , donde este último depende ligeramente de los valores de  $\delta_3$  (ver círculos y triángulos sólidos en el recuadro) debido a que  $\delta_3$  solamente modifica  $\varepsilon_0(\mathbf{k})$  en la ecuación (118). En efecto, para  $n \ll 1$  la superconductividad con simetría  $d$  es suprimida y el estado superconductor del canal  $p$  viene a ser el estado base aún para  $\delta_3 \ll \Delta t_3$ . Adicionalmente, los resultados muestran la existencia de una máxima temperatura crítica ( $T_c^{\max}$ ) en una óptima densidad electrónica ( $n_{op}$ ), los cuales son respectivamente graficados en la Figura 4.3.2, ambas como función de  $\delta_3$ , donde el límite cuando  $\delta_3 \rightarrow 0$  corresponde a  $n_{op} \simeq 1.3$ , muy cercano al valor esperado del llenado de la banda  $\gamma$  del  $Sr_2RuO_4$  [Oguchi, 1995] [Singh, 1995].



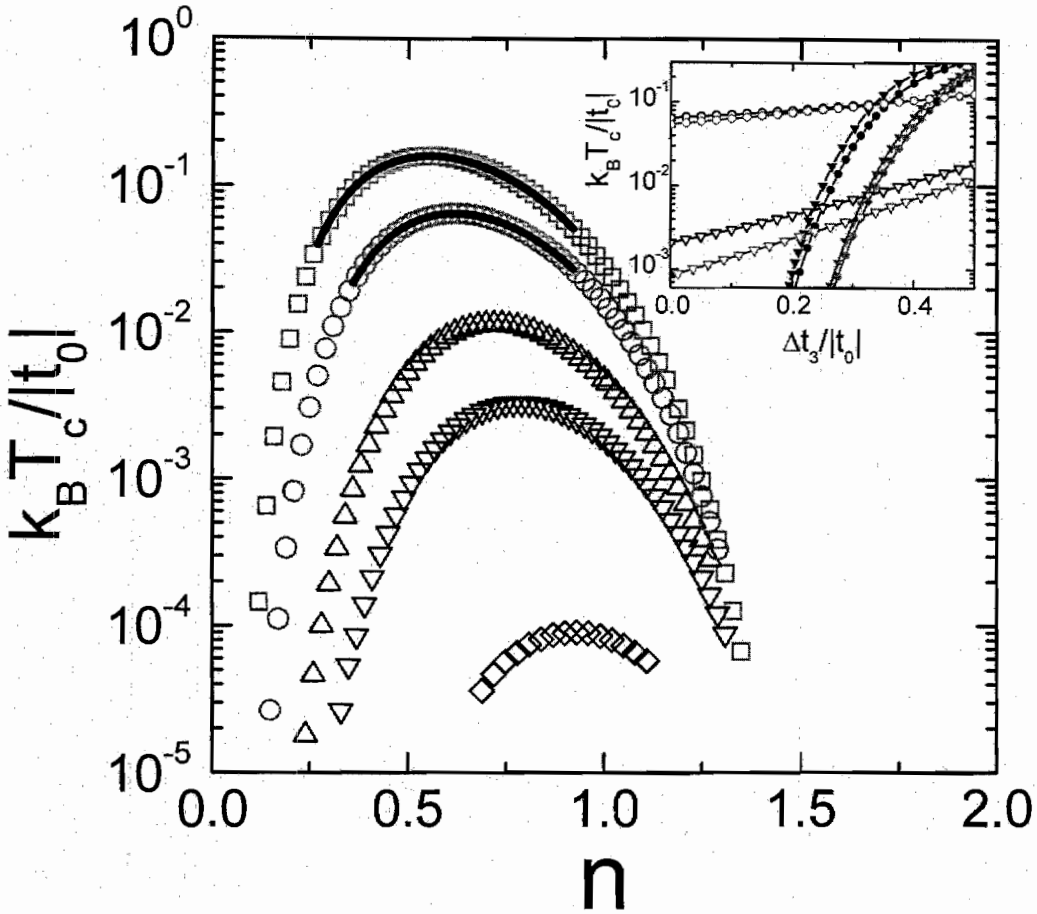


Figura 4.3.1 La temperatura crítica ( $T_c$ ) contra la densidad de electrones ( $n$ ) para  $V = \Delta t = \Delta t_3 = \delta = 0$ ,  $t_0 = -0.3 |t_0|$ ,  $\delta_3 = 0.5 |t_0|$  (cuadrados),  $0.375 |t_0|$  (círculos),  $0.25 |t_0|$  (triángulos hacia arriba),  $0.2 |t_0|$  (triángulos hacia abajo),  $0.125 |t_0|$  (rombos) y arbitraria  $U$ . El recuadro muestra la variación de  $T_c$  contra  $\Delta t_3$  para los canales  $d$  y  $p$ , representados respectivamente por círculos negros (grises) abiertos y sólidos, con  $\delta_3 = 0.375 |t_0|$  y  $n = 0.61$  ( $n = 0.5$ ), así como triángulos negros (grises) abiertos y sólidos para  $\delta_3 = 0.2 |t_0|$  y  $n = 0.61$  ( $n = 0.5$ ).

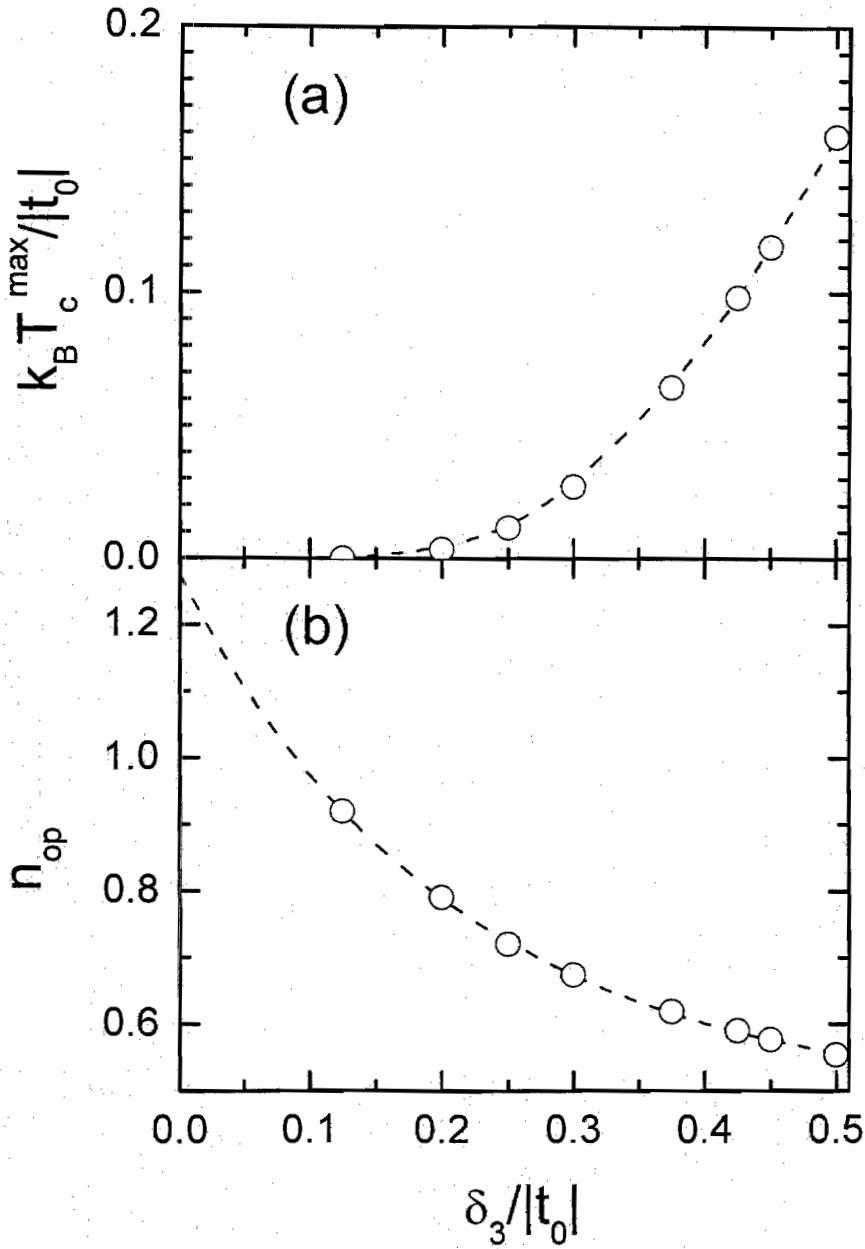


Figura 4.3.2. Las variaciones de (a) máxima temperatura crítica ( $T_c^{\max}$ ) y (b) densidad óptima ( $n_{op}$ ) como funciones de  $\delta_3$ .

### 4.3.2. Potencial Atractivo

Con el objetivo de entender la existencia del máximo en la temperatura crítica ( $T_c^{\max}$ ), estudiaremos con detalle en esta sección la energía potencial promedio entre partículas [Millán, *et al.*, 2005b] definida como  $W_T = \langle \Psi | \hat{H}_{int} | \Psi \rangle$ , donde  $\hat{H}_{int}$  es la parte de interacción electrón-electrón del hamiltoniano [Ec. (266)] y  $|\Psi\rangle$  es la función de onda del estado superconductor [Ec. (265)]. Dicha energía nos proporciona información sobre la energía requerida para destruir el estado superconductor. En el Apéndice D hemos desarrollado las fórmulas necesarias para cuantificar esta energía [Ec (288)], la cual dentro de la aproximación de campo medio se transforma a [Rickayzen, 1966]

$$\begin{aligned}
 W_T = & \frac{V}{16\pi^4} \iint_{BZ} [\sin(k_x a) \sin(k'_x a) + \sin(k_y a) \sin(k'_y a)] \times \\
 & \sqrt{1 - \frac{[\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]^2}{E_p^2(\mathbf{k})}} \sqrt{1 - \frac{[\varepsilon(\mathbf{k}') - \mu]^2}{E_p^2(\mathbf{k}')}} dk_x dk_y dk'_x dk'_y \\
 & - \frac{\delta_3}{4\pi^4} \iint_{BZ} [\sin(k_x a) \sin(k'_y a) + \sin(k'_x a) \sin(k_y a)] \times \\
 & \sqrt{1 - \frac{[\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu]^2}{E_p^2(\mathbf{k})}} \sqrt{1 - \frac{[\varepsilon(\mathbf{k}') - \mu]^2}{E_p^2(\mathbf{k}')}} dk_x dk_y dk'_x dk'_y. \quad (161)
 \end{aligned}$$

donde se ha utilizado la Ec. (55) y la condición de normalización [Ec. (40)]. En las figuras 4.3.3.(a), (b) y (c), mostramos respectivamente la dependencia de  $T_c$ ,  $\Delta_p$  y  $W_T$  con respecto a  $n$ , para  $V = \Delta t = 0$ ,  $t'_0 = -0.3|t_0|$ ,  $\delta_3 = 0.375|t_0|$  y  $\Delta t_3 = 0.75|t_0|$  (círculos),  $0.5|t_0|$  (triángulos hacia arriba), y  $0$  (triángulos hacia abajo). Obsérvese que en las figuras 4.3.3.(a)  $n_{op} = 0.52, 0.55$  y  $0.61$ , (b)  $n_{op} = 0.528, 0.592$  y  $0.64$ , y (c)  $n_{op} = 0.524, 0.592$  y  $0.64$ , para  $\Delta t_3 = 0.75|t_0|, 0.5|t_0|$  y  $0$ , respectivamente en cada figura. Cabe mencionar que los resultados presentados en las figuras 4.3.3.(a) y (b) son obtenidos usando las dos ecuaciones acopladas [Ecs. (116) y (119)], mientras que la figura 4.3.3.(c) es obtenida de la Ec. (161). Nótese como  $n_{op}$  para  $\Delta_p$  prácticamente coincide con el de la energía potencial  $-W_T$  y es ligeramente diferente al correspondiente a la  $T_c$ , hecho que podría deberse a que  $\Delta_p$  y  $-W_T$  son calculadas a  $T = 0$  a diferencia de la figura 4.3.3.(a).

Superconductividad con simetría  $p$

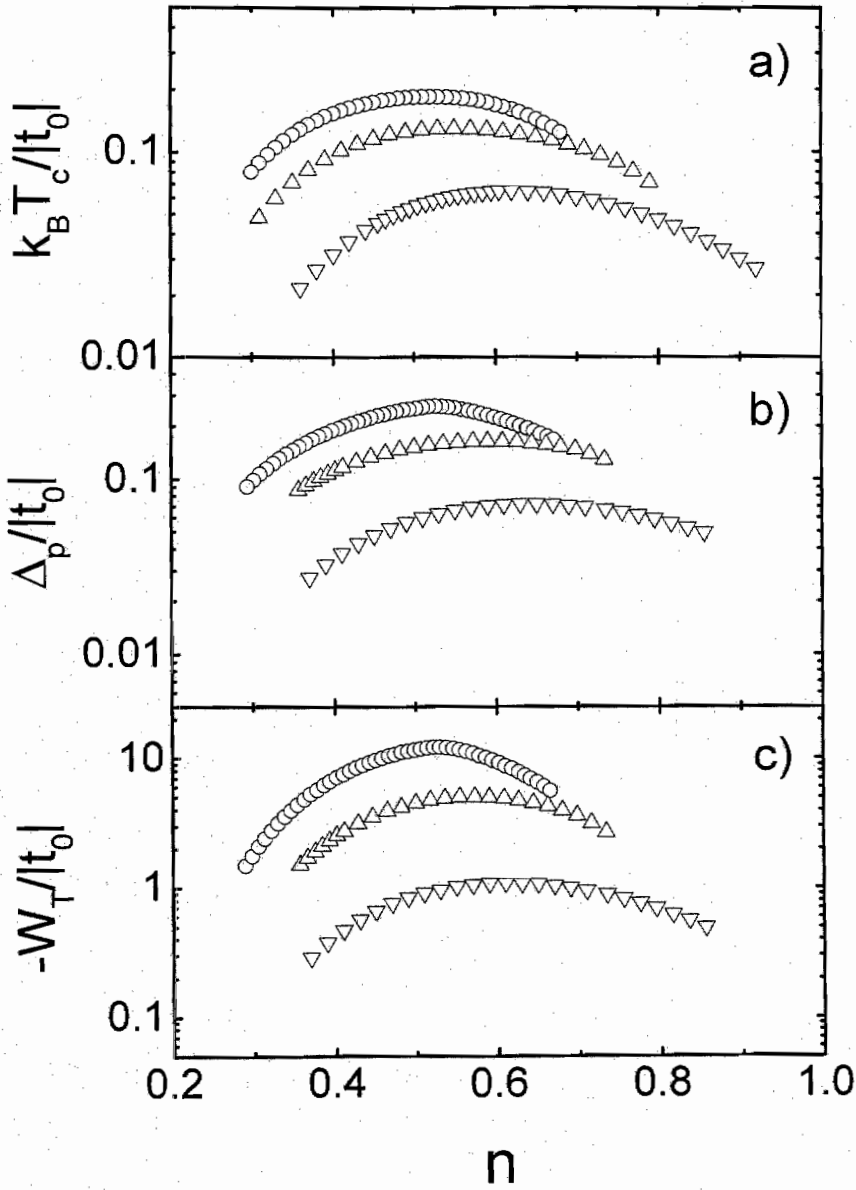


Figura 4.3.3 (a) Temperatura crítica ( $T_c$ ), (b) brecha superconductora ( $\Delta_p$ ) y (c) energía potencial promedio ( $W_T$ ) contra densidad de electrones ( $n$ ) para  $V = \Delta t = \delta = 0$ ,  $t_0 = -0.3 |t_0|$ ,  $\Delta t_3 = 0.75 |t_0|$  (círculos),  $\Delta t_3 = 0.5 |t_0|$  (triángulos hacia arriba) y 0 (triángulos hacia abajo), con  $\delta_3 = 0.375 |t_0|$  y  $U$  arbitraria.

### 4.3.3. La Brecha Energética

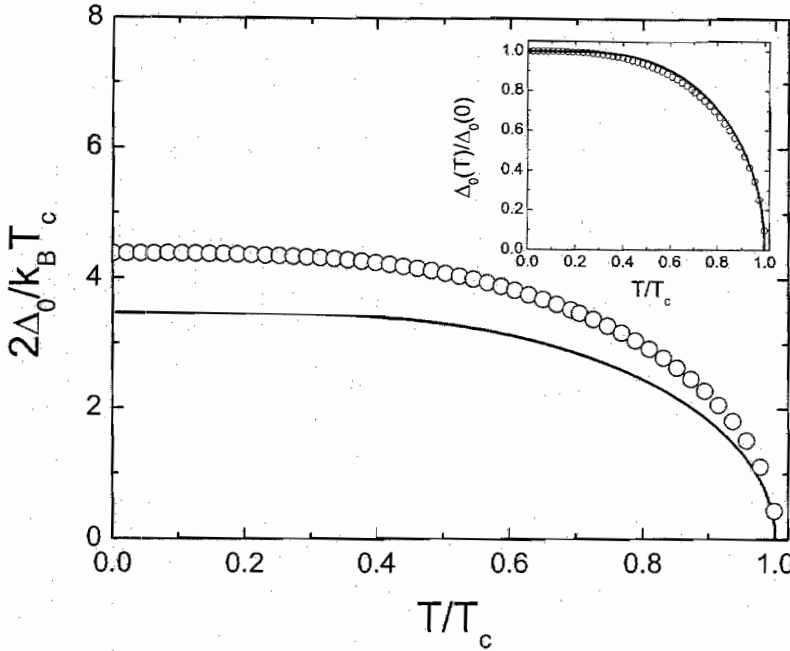


Figura 4.3.4 Dependencia de la temperatura de la razón de la brecha energética  $[2\Delta_0/(k_B T_c)]$  para el caso  $p$ -wave (círculos) de la figura 4.3.1 con  $V = \Delta t = \Delta t_3 = \delta = 0$ ,  $t'_0 = -0.3 |t_0|$ ,  $\delta_3 = 0.375 |t_0|$  y  $n = 0.61$ . El caso  $s$ -wave (línea sólida) con  $U = -2.5 |t_0|$  y  $t'_0 = -0.3 |t_0|$ .

En la figura 4.3.4 mostramos la razón de la brecha energética  $(2\Delta_0/k_B T_c)$  y su dependencia con la temperatura para el mismo sistema de la figura 4.3.1 con  $\delta_3 = 0.375 |t_0|$  (círculos) y  $n = 0.61$ . A fin de hacer una comparación con el estado superconductor con simetría  $s$  obtenido del modelo de Hubbard con  $U$  negativa, mostramos en la misma figura 4.3.4 la razón de la brecha energética para un sistema con  $U = -2.5 |t_0|$ ,  $t'_0 = -0.3 |t_0|$  y  $n = 0.61$  (línea sólida). En el recuadro de esta figura podemos ver la razón normalizada de la brecha energética  $(\Delta_0(T)/\Delta_0(0))$  para los mismos sistemas que el de la figura principal y podemos observar como el comportamiento para el canal  $p$  es diferente al del canal  $s$ , donde éste último correspondería a un sistema del tipo BCS.

4.3.4. El espectro de excitación

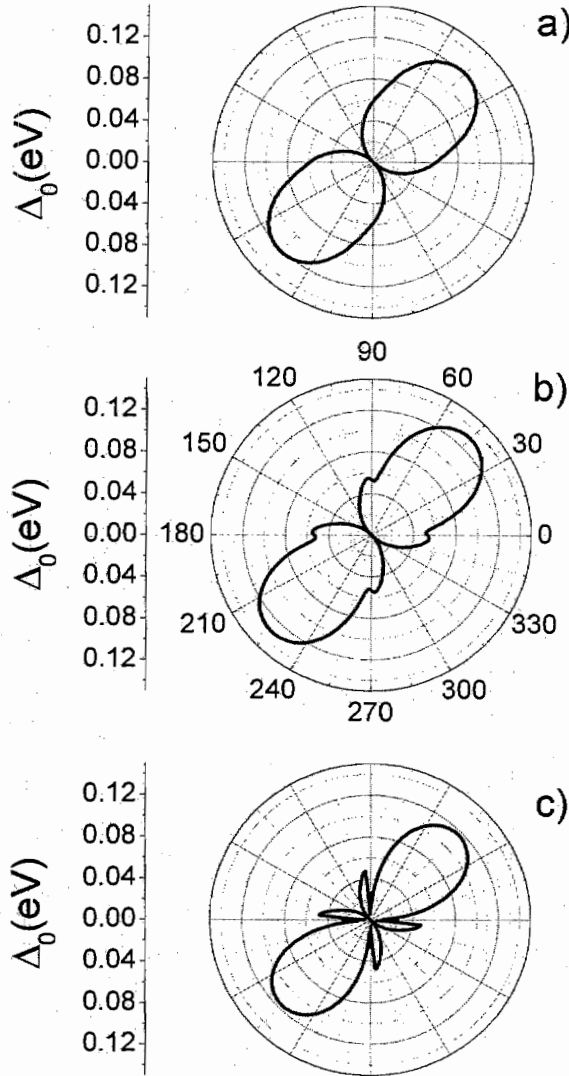


Figura 4.3.5 Brecha energética de excitación de cuasipartículas ( $\Delta_0$ ) como una función del ángulo polar para  $V = \Delta t = \delta = 0$ ,  $t_0 = 0.4eV$ ,  $t'_0 = -0.12eV$ ,  $\Delta t_3 = 0.2eV$ ,  $\delta_3 = 0.15eV$  con arbitraria  $U$  y densidades de electrones (a)  $n = 0.5$ , (b)  $n = 0.6$  y (c)  $n = 0.7$ .

A fin de ilustrar la simetría del estado superconductor con espín triplete, mostramos en las figuras 4.3.5 (a), (b) y (c) el espectro de excitación esperado para el canal  $p$  con  $V = \Delta t = \delta = 0$ ,  $t_0 = 0.4eV$ ,  $t'_0 = -0.3|t_0|$ ,  $\Delta t_3 = 0.5|t_0|$  and  $\delta_3 = 0.375|t_0|$  con arbitraria  $U$  y densidades de electrones  $n = 0.5, 0.6$  y  $0.7$ , respectivamente, en función del ángulo polar  $\theta = \tan^{-1}(k_y/k_x)$  y alrededor del punto  $(\pi, \pi)$ , punto en el que se encuentra el máximo de  $E_p(\mathbf{k})$ . En estos espectros se muestra que de una simetría  $p$  con una línea nodal en  $135^\circ$  [ver figura 4.3.5.(a)], podemos pasar a otra simetría con tres líneas nodales [ver figura 4.3.5.(c)] conforme  $n$  aumenta. Evidentemente la orientación de la línea nodal dependerá del signo de  $\delta_3$ , el caso expuesto en las figuras 4.3.5 corresponde al signo positivo, mientras que para el caso negativo las líneas nodales estarían rotadas 90 grados.

En resumen, la existencia de una brecha energética superconductor ( $\Delta_p$ ) y una brecha de energía en el espectro de excitación de cuasi-partículas ( $\Delta_0$ ) -ambas con simetría  $p$ - nos permiten concluir que la superconductividad con espín triplete en una red cuadrada con acoplamiento débil entre plano y plano puede ser originada por una distorsión infinitesimal de los ángulos rectos de la misma.

## Conclusiones

En este trabajo de investigación hemos abordado el problema de la correlación electrónica dentro del modelo de Hubbard. En particular, hemos analizado con detalle el apareamiento electrónico y la superconductividad con espín triplete. El primero se resuelve de manera exacta mediante el método del espacio de estados, el cual permite tratar el problema como uno de "impurezas de enlace". Los principales resultados de esta primera parte son las siguientes:

1) Una distorsión infinitesimal a los ángulos rectos de la red cuadrada produce un desdoblamiento de los estados degenerados apareados con simetría  $p$  y uno de esos estados puede pasar a ser estado base del sistema.

2) Para el caso de electrones, dicho apareamiento se presenta a partir de una distorsión infinitesimal.

3) En cambio, para el caso de huecos, el apareamiento con simetría  $d$  es favorecido y una distorsión finita se requiere para que uno de los estados apareados  $p$  pueda pasar a ser estado base.

4) La energía de amarre y la longitud de coherencia de los pares tiene un comportamiento lineal con respecto a la magnitud del parámetro de distorsión  $\delta_3$ .

En la segunda parte del análisis hemos seguido un formalismo generalizado de la teoría BCS, considerando que todos los electrones pueden participar en la superconductividad. Los principales resultados son:

1) La solución analítica en el límite diluido predice un comportamiento independiente de la correlación  $\delta_3$ , tanto para  $T_c$  como para  $\Delta_0$  y el cociente  $\Delta_0/2k_B T_c$ .

2) La existencia de una concentración electrónica óptima ( $n_{op}$ ) para  $T_c$  máxima.

3) El comportamiento de la razón de la brecha energética con la temperatura es diferente que el de la teoría BCS y alcanza valores superiores a 3.52.

4) Los espectros de excitación del estado superconductor con espín triplete muestran una simetría  $p$  en la región de una densidad electrónica ( $n$ ) menor que  $n_{op}$  y una simetría más compleja para  $n > n_{op}$ .

5) La existencia de un estado base con simetría  $p$  en competición con los estados con simetría  $s^*$  y  $d$  predominantemente en la región de  $n < n_{op}^{(p)}$ , donde  $n_{op}^{(p)}$  es la concentración electrónica óptima del canal  $p$ .

En resumen, esta investigación doctoral ha sido para mi una motivación al haber adquirido los principios básicos de la teoría cuántica de sólidos y aplicarlos a un fenómeno específico, como es el caso de la superconductividad anisotrópica. Así mismo, he tenido la oportunidad de desarrollar con todo detalle una teoría cuántica de la superconductividad con espín triplete dentro del modelo de Hubbard. Pienso



que la metodología utilizada en esta tesis podría eventualmente aplicarse a otros fenómenos cooperativos en sólidos, tales como magnetismo itinerante, ondas de densidad de carga y de espín.

De los resultados obtenidos se puede concluir lo siguiente:

1) La búsqueda de la solución del estado superconductor se simplifica enormemente utilizando el nuevo método propuesto para desacoplar las dos ecuaciones simultáneas del estado superconductor con espín triplete.

2) La superconductividad con simetría  $p$  puede inducirse por una distorsión infinitesimal en la red cuadrada. Esta posibilidad la hemos predicho por primera vez a partir del modelo de Hubbard.

3) Los primeros resultados obtenidos de la competencia entre superconductividad con espín singulete y triplete, sugieren una descripción unificada de estos dos tipos de superconductores en base a una interacción del tipo carga-enlace a segundos vecinos ( $\Delta t_3$ ).

Por último, a pesar de que en esta tesis la investigación de la superconductividad se realizó sobre una red cuadrada, creemos que el acoplamiento entre plano y plano podría ser crucial para la ocurrencia de dicho fenómeno. En efecto, los primeros resultados al introducir un acoplamiento en esos planos muestran una disminución de  $T_c$ , debido al aumento de la energía cinética de las partículas. Así mismo, cabe mencionar que el método empleado en esta tesis podría aplicarse en la descripción de los superconductores no convencionales, tales como los cupratos superconductores y el  $Sr_2RuO_4$ .

## Apéndice A

### Transformación al Espacio Recíproco

El hamiltoniano de la Ec. (14) puede escribirse como

$$\hat{H} = \hat{H}_{t_0} + \hat{H}_{t'_0} + \hat{H}_U + \hat{H}_V + \hat{H}_{\Delta t} + \hat{H}_{\Delta t_3}, \quad (162)$$

donde

$$\hat{H}_{t_0} = t_0 \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}, \quad (163)$$

$$\hat{H}_{t'_0} = t'_0 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}, \quad (164)$$

$$\hat{H}_U = U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow}, \quad (165)$$

$$\hat{H}_V = \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j, \quad (166)$$

$$\hat{H}_{\Delta t} = \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} (\hat{n}_{i,-\sigma} + \hat{n}_{j-\sigma}), \quad (167)$$

y

$$\hat{H}_{\Delta t_3} = \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle, \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \hat{n}_l, \quad (168)$$

donde  $t_0$  y  $t'_0$  podrán tomar valores positivos o negativos dependiendo del material superconductor.

Como veremos más adelante, transformando al espacio  $\mathbf{k}$  cada uno de estos términos se llega a

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_0(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \\ & \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \uparrow} + \\ & \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma} W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma}, \end{aligned} \quad (169)$$

siendo  $2\mathbf{q}$  el vector de onda del centro de masa de los pares. Cuando existe una anisotropía de los saltos a segundos vecinos de una red cuadrada como la explicada en la sección 2.2, obtenemos los potenciales  $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}$  y  $W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}$  entre pares de

electrones con espines antiparalelos y paralelos, respectivamente, dados por

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} = U + V \beta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \Delta t [\beta(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \beta(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \beta(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \beta(-\mathbf{k}' + \mathbf{q})] \\ + \Delta t_3^+ [\gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \gamma(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, -\mathbf{k}' + \mathbf{q})] \\ + \Delta t_3^- [\zeta(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \zeta(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, -\mathbf{k}' + \mathbf{q})], \quad (170)$$

y

$$W_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} = \frac{V}{2} \beta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \Delta t_3^+ \gamma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}' + \mathbf{q}) \\ + \Delta t_3^- \zeta(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}' + \mathbf{q}), \quad (171)$$

donde

$$\beta(\mathbf{k}) = 2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)], \quad (172)$$

$$\gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 2 \cos(k_x a + k'_y a) + 2 \cos(k'_x a + k_y a), \quad (173)$$

$$\zeta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 2 \cos(k_x a - k'_y a) + 2 \cos(k'_x a - k_y a). \quad (174)$$

La expresión para la relación de dispersión es

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = 2t_0 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + \\ 2t'_+ \cos(k_x a + k_y a) + 2t'_- \cos(k_x a - k_y a). \quad (175)$$

En las ecuaciones (170), (171) y (175) hemos hecho la distinción de los saltos a segundos vecinos  $t'_\pm$  y  $\Delta t_3^\pm$  de acuerdo a las direcciones  $(\mathbf{k}_x \pm \mathbf{k}_y)$  respectivamente, donde las mismas definiciones para  $t'_\pm$  y  $\Delta t_3^\pm$  como en la sección 2.2 han sido consideradas.

Desarrollaremos cada término del hamiltoniano [Ec. (162)] utilizando las siguientes relaciones [Maham, 1990] a fin de pasar al espacio recíproco

$$c_{i,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \quad (176)$$

$$c_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (177)$$

y

$$\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{N_s} \sum_j e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_j}. \quad (178)$$

Para el primer término de la Ec. (162)

$$\hat{H}_{t_0} = t_0 \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{k},\mathbf{k}' \\ \langle i,j \rangle, \sigma}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma} \quad (179)$$

debemos considerar que el sitio  $j$  es primer vecino de  $i$  escribimos  $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_\gamma$  donde  $\mathbf{R}_\gamma$  es el vector que une  $\mathbf{R}_i$  con  $\mathbf{R}_j$ . Con esta terminología obtenemos

$$\hat{H}_{t_0} = t_0 \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \zeta, i, \sigma}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}', \sigma}, \quad (180)$$

por lo que

$$\hat{H}_{t_0} = t_0 \sum_{\mathbf{k}, \zeta, \sigma} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (181)$$

Para los primeros vecinos  $\mathbf{R}_l$  de  $\mathbf{R}_i$ , podemos escribir  $\mathbf{R}_l = \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_\zeta$  donde las coordenadas de los dos primeros vecinos en la dirección de  $k_x$  son  $(a, 0)$  y  $(-a, 0)$ . Para la dirección  $k_y$  tenemos  $(0, a)$  y  $(0, -a)$ , entonces

$$\begin{aligned} \sum_{\zeta} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\zeta} &= e^{-i(k_x, k_y) \cdot (a, 0)} + e^{-i(k_x, k_y) \cdot (-a, 0)} + e^{-i(k_x, k_y) \cdot (0, a)} + e^{-i(k_x, k_y) \cdot (0, -a)} \\ &= 2 \cos(k_x a) + 2 \cos(k_y a), \end{aligned} \quad (182)$$

por lo tanto

$$\hat{H}_{t_0} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} 2t_0 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (183)$$

el coeficiente de los operadores aparece como el primer sumando en  $\varepsilon_0(\mathbf{k})$  de (175).

A continuación analizamos el segundo término de la Ec. (162). El desarrollo de este término es similar al anterior,  $\hat{H}_{t_0}$ , con la única diferencia de que ahora  $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_\gamma$  donde  $\mathbf{R}_\gamma$  denota a los 4 segundos vecinos de cada sitio  $i$ , las coordenadas de los dos segundos vecinos en la dirección de  $(k_x, k_y)$  son  $(a, a)$  y  $(-a, -a)$ , análogamente para la dirección  $(k_x, -k_y)$  tenemos  $(a, -a)$  y  $(-a, a)$ , donde  $a$  es el parámetro de la red. Obtenemos entonces

$$\begin{aligned} \hat{H}_{t'_0} &= t'_0 \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\langle\langle i, j \rangle\rangle \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}', \sigma} \\ &= t'_0 \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{i, \gamma \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_\gamma} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}', \sigma} \\ &= t'_0 \sum_{\gamma, \mathbf{k}, \sigma} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_\gamma} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma}. \end{aligned} \quad (184)$$

Podemos distinguir dos sumandos,  $t'_+$  para la dirección  $(k_x, k_y)$  y  $t'_-$  para la dirección  $(-k_x, k_y)$ , por lo cual dado que

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{\gamma}} &= e^{-i(k_x, k_y)\cdot(a, a)} + e^{-i(k_x, k_y)\cdot(-a, -a)} + e^{-i(k_x, k_y)\cdot(a, -a)} + e^{-i(k_x, k_y)\cdot(-a, a)} \\ &= 2 \cos(k_x a + k_y a) + 2 \cos(k_x a - k_y a), \end{aligned} \quad (185)$$

entonces

$$\hat{H}_{t'_0} = 2t'_+ \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \cos(k_x a + k_y a) c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} + 2t'_- \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \cos(k_x a - k_y a) c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (186)$$

Los coeficientes de los operadores aparecen como el tercer y cuarto sumando de  $\epsilon_0(\mathbf{k})$  en la Ec.(175).

Hasta el momento se han desarrollado los términos de dos operadores cuyos coeficientes aparecen en la relación de dispersión [Ec. (175)]. Continuaremos con los términos de cuatro operadores

$$\begin{aligned} \hat{H}_U &= U \sum_i \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}', \uparrow} \sum_{\mathbf{k}''} e^{i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'', \downarrow}^{\dagger} \sum_{\mathbf{k}'''} e^{-i\mathbf{k}'''\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}''', \downarrow} \\ &= \frac{U}{N^2} \sum_{i, \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' - \mathbf{k}''')\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{\mathbf{k}'', \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}''', \downarrow} \\ &= \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{\mathbf{k}'', \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}''', \downarrow}. \end{aligned} \quad (187)$$

Aquí proponemos un cambio de variable de tal forma que

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' - \mathbf{k}''' = \mathbf{0}, \quad (188)$$

escogiendo

$$\mathbf{k} = \mathbf{p} + \mathbf{q}, \quad \mathbf{k}' = \mathbf{p}' + \mathbf{q}, \quad \mathbf{k}'' = -\mathbf{p} + \mathbf{q}, \quad \mathbf{k}''' = -\mathbf{p}' + \mathbf{q}, \quad (189)$$

que cumplen con la condición (188), por lo que

$$\begin{aligned} \hat{H}_U &= \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{p} + \mathbf{q}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{p}' + \mathbf{q}, \uparrow} c_{-\mathbf{p} + \mathbf{q}, \downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{p}' + \mathbf{q}, \downarrow} \\ &= \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \uparrow} c_{-\mathbf{k} - \mathbf{q}, \downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \downarrow} \\ &= \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k} - \mathbf{q}, \downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \downarrow} c_{\mathbf{k}' + \mathbf{q}, \uparrow}. \end{aligned} \quad (190)$$

Este término corresponde a uno de espines antiparalelos y será tomando en cuenta en  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}$ . Es de esperarse que el caso triplete de espines paralelos no depende de  $U$  (ver la figura 1.3.2).

Del cuarto término de la Ec. (162) se obtienen tanto términos con espín paralelo como antiparalelo

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_V &= \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j \\
 &= \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{i,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow})(\hat{n}_{j,\uparrow} + \hat{n}_{j,\downarrow}) \\
 &= \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{j,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow} \hat{n}_{j,\uparrow} + \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow} + \hat{n}_{i,\downarrow} \hat{n}_{j,\downarrow}), \quad (191)
 \end{aligned}$$

El término de espín antiparalelo serán tomados en cuenta en el potencial  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}}$ , el cual corresponde a [Pérez, 2002]

$$\hat{H}_V^{(A)} = \frac{V}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma} \beta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \uparrow}, \quad (192)$$

donde

$$\beta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\cos(k_x a - k'_x a) + 2\cos(k_y a - k'_y a) \quad (193)$$

Para los espines paralelos

$$\hat{H}_V^{(P)} = \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{j,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow} \hat{n}_{j,\downarrow}), \quad (194)$$

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_V^{(P)} &= \frac{V}{2N^2} \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}', \uparrow} e^{i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger e^{-i\mathbf{k}'''\cdot\mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}''', \uparrow} + \\
 &\frac{V}{2N^2} \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}', \downarrow} e^{i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger e^{-i\mathbf{k}'''\cdot\mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}''', \downarrow}, \quad (195)
 \end{aligned}$$

Nuevamente consideramos los primeros vecinos  $\mathbf{R}_j$  de  $\mathbf{R}_i$

$$\begin{aligned} \hat{H}_V^{(P)} &= \frac{V}{2N^2} \sum_{\substack{\langle i,j \rangle, \zeta \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{k}''-\mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_i} e^{i(\mathbf{k}''-\mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''', \uparrow} + \\ &\frac{V}{2N^2} \sum_{\substack{\langle i,j \rangle, \zeta \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{k}''-\mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_i} e^{i(\mathbf{k}''-\mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''', \downarrow}, \quad (196) \end{aligned}$$

por lo cual

$$\begin{aligned} \hat{H}_V^{(P)} &= \frac{V}{2N} \sum_{\substack{i, \zeta \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') e^{i(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''', \uparrow} + \\ &\frac{V}{2N} \sum_{\substack{i, \zeta \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}'''}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') e^{i(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''', \downarrow}. \quad (197) \end{aligned}$$

Si realizamos los cambios de variables de acuerdo a (189) esta última ecuación se transforma

$$\begin{aligned} \hat{H}_V^{(P)} &= \frac{V}{2N} \sum_{\substack{\zeta \\ \mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}}} e^{i(-\mathbf{p}+\mathbf{q}-(-\mathbf{p}'+\mathbf{q})) \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \uparrow} c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \uparrow} + \\ &\frac{V}{2N} \sum_{\substack{\zeta \\ \mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}}} e^{i(-\mathbf{p}+\mathbf{q}-(-\mathbf{p}'+\mathbf{q})) \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \downarrow} \\ &= \frac{V}{2N} \sum_{\substack{\zeta \\ \mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}}} e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \uparrow} c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \uparrow} + \\ &\frac{V}{2N} \sum_{\substack{\zeta \\ \mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}}} e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \downarrow}. \quad (198) \end{aligned}$$

En esta última ecuación podemos hacer cambios de índices y tomando en cuenta que

$$\sum_{\zeta} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_\zeta} = \beta(\mathbf{k}'-\mathbf{k}), \quad (199)$$

ya que  $\mathbf{R}_C$  corresponde a los primeros vecinos, tenemos

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_V^{(P)} &= \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \beta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \uparrow} c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \uparrow} + \\
 &\quad \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \beta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} \\
 &= \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma} \beta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma}, \quad (200)
 \end{aligned}$$

reacomodando los operadores

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_V^{(P)} &= \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma} \beta(-2\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \\
 &\quad \frac{V}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma} \beta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma}. \quad (201)
 \end{aligned}$$

El coeficiente del primer término de esta ecuación se anula. Efectivamente, de la definición (193) observamos que la integral de  $\beta(-2\mathbf{k})$  sobre  $\mathbf{q}$  en la primera zona de Brillouin es cero. Para el término de cuatro operadores, su coeficiente lo hemos considerado en el primer sumando de  $W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}$  en la ecuación (171).

Por su definición, el término de  $\Delta t$  de la Ec. (162) no podrá proporcionar términos para el potencial triplete ya que la restricción de espín contrario es impuesta en el paréntesis, sin embargo, corresponde a uno de espines antiparalelos [Pérez, 2002]

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{\Delta t} &= \frac{\Delta t}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} [\beta(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \beta(-\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \beta(\mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \beta(-\mathbf{k}' + \mathbf{q})] \\
 &\quad \times c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \uparrow} \quad (202)
 \end{aligned}$$

y será tomado en cuenta en  $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}}$ .



Para el último término de la Ec. (162) tenemos

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\Delta t_3} &= \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle, \\ \langle \langle i,j \rangle \rangle, \sigma}} \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}',\sigma} \\
&\quad \left( \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}''} e^{i\mathbf{k}'' \cdot \mathbf{R}_i} c_{i,\uparrow}^\dagger \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}'''} e^{-i\mathbf{k}''' \cdot \mathbf{R}_i} c_{i,\uparrow} \right) \\
&+ \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle, \\ \langle \langle i,j \rangle \rangle, \sigma}} \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}',\sigma} \\
&\quad \left( \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}''} e^{i\mathbf{k}'' \cdot \mathbf{R}_i} c_{i,\downarrow}^\dagger \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}'''} e^{-i\mathbf{k}''' \cdot \mathbf{R}_i} c_{i,\downarrow} \right), \tag{203}
\end{aligned}$$

donde  $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_\gamma$  y  $\mathbf{R}_\gamma$  denota a los 4 segundos vecinos de cada sitio  $i$ . Las coordenadas de los dos segundos vecinos en la dirección de  $(k_x, k_y)$  son  $(a, a)$  y  $(-a, -a)$ , análogamente para la dirección  $(k_x, -k_y)$  tenemos  $(a, -a)$  y  $(-a, a)$ , donde  $a$  es el parámetro de la red. análogamente para los primeros vecinos  $\mathbf{R}_l$  de  $\mathbf{R}_i$ , podemos escribir  $\mathbf{R}_l = \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_\zeta$  donde las coordenadas de los dos primeros vecinos en la dirección de  $k_x$  son  $(a, 0)$  y  $(-a, 0)$ . Para la dirección  $k_y$  tenemos  $(0, a)$  y  $(0, -a)$ . Con estas consideraciones, podemos escribir (203) como

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\Delta t_3} &= \Delta t_3 \frac{1}{N_s^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}''' \\ i, \gamma, \zeta, \sigma}} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_\gamma} e^{i(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma} c_{\mathbf{k}'',\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''',\uparrow} + \\
&\quad \Delta t_3 \frac{1}{N_s^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}''' \\ i, \gamma, \zeta, \sigma}} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_\gamma} e^{i(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma} c_{\mathbf{k}'',\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''',\downarrow}, \tag{204}
\end{aligned}$$

y usando la Ec. (178), obtenemos

$$\begin{aligned}
&\hat{H}_{\Delta t_3} \\
&= \Delta t_3 \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}''' \\ \gamma, \zeta, \sigma}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_\gamma} e^{i(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma} c_{\mathbf{k}'',\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''',\uparrow} + \\
&\quad \Delta t_3 \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'', \mathbf{k}''' \\ \gamma, \zeta, \sigma}} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_\gamma} e^{i(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}''') \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma} c_{\mathbf{k}'',\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}''',\downarrow}. \tag{205}
\end{aligned}$$

Ahora realizamos los cambios de variable (189), por lo cual

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Delta t_3} &= \Delta t_3 \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q} \\ \gamma, \zeta, \sigma}} e^{-i(\mathbf{p}'+\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_\gamma} e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \uparrow} + \\ &\Delta t_3 \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q} \\ \gamma, \zeta, \sigma}} e^{-i(\mathbf{p}'+\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_\gamma} e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{R}_\zeta} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \downarrow}, \end{aligned} \quad (206)$$

desarrollando de acuerdo a las interacciones de segundo vecino dado que hay un primer vecino (salto correlacionado)

$$\begin{aligned} &\sum_{\gamma, \zeta} e^{-i(\mathbf{p}'+\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_\gamma} e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{R}_\zeta} \\ &= e^{-i(\mathbf{p}'_x+\mathbf{q}_x, \mathbf{p}'_y+\mathbf{q}_y) \cdot (a, a)} [e^{i(\mathbf{p}'_x-\mathbf{p}_x, \mathbf{p}'_y-\mathbf{p}_y) \cdot (a, 0)} + e^{i(\mathbf{p}'_x-\mathbf{p}_x, \mathbf{p}'_y-\mathbf{p}_y) \cdot (0, a)}] + \\ &e^{-i(\mathbf{p}'_x+\mathbf{q}_x, \mathbf{p}'_y+\mathbf{q}_y) \cdot (-a, -a)} [e^{i(\mathbf{p}'_x-\mathbf{p}_x, \mathbf{p}'_y-\mathbf{p}_y) \cdot (-a, 0)} + e^{i(\mathbf{p}'_x-\mathbf{p}_x, \mathbf{p}'_y-\mathbf{p}_y) \cdot (0, -a)}] + \\ &e^{-i(\mathbf{p}'_x+\mathbf{q}_x, \mathbf{p}'_y+\mathbf{q}_y) \cdot (a, -a)} [e^{i(\mathbf{p}'_x-\mathbf{p}_x, \mathbf{p}'_y-\mathbf{p}_y) \cdot (a, 0)} + e^{i(\mathbf{p}'_x-\mathbf{p}_x, \mathbf{p}'_y-\mathbf{p}_y) \cdot (0, -a)}] + \\ &e^{-i(\mathbf{p}'_x+\mathbf{q}_x, \mathbf{p}'_y+\mathbf{q}_y) \cdot (-a, a)} [e^{i(\mathbf{p}'_x-\mathbf{p}_x, \mathbf{p}'_y-\mathbf{p}_y) \cdot (-a, 0)} + e^{i(\mathbf{p}'_x-\mathbf{p}_x, \mathbf{p}'_y-\mathbf{p}_y) \cdot (0, a)}], \end{aligned} \quad (207)$$

simplificando

$$\begin{aligned} &\sum_{\gamma, \zeta} e^{-i(\mathbf{p}'+\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_\gamma} e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{R}_\zeta} \\ &= e^{-ia(\mathbf{p}_x+\mathbf{q}_x+\mathbf{p}'_y+\mathbf{q}_y)} + e^{-ia(\mathbf{p}'_x+\mathbf{q}_x+\mathbf{p}_y+\mathbf{q}_y)} + \\ &e^{ia(\mathbf{p}_x+\mathbf{q}_x+\mathbf{p}'_y+\mathbf{q}_y)} + e^{ia(\mathbf{p}'_x+\mathbf{q}_x+\mathbf{p}_y+\mathbf{q}_y)} + \\ &e^{-ia(\mathbf{p}_x+\mathbf{q}_x-\mathbf{p}'_y-\mathbf{q}_y)} + e^{-ia(\mathbf{p}'_x+\mathbf{q}_x-\mathbf{p}_y-\mathbf{q}_y)} + \\ &e^{ia(\mathbf{p}_x+\mathbf{q}_x-\mathbf{p}'_y-\mathbf{q}_y)} + e^{ia(\mathbf{p}'_x+\mathbf{q}_x-\mathbf{p}_y-\mathbf{q}_y)}. \end{aligned} \quad (208)$$

De esta última ecuación observemos que los cuatro primeros sumandos provienen de los saltos en la dirección  $(k_x, k_y)$ , mientras que los últimos cuatro de  $(-k_x, k_y)$ , por lo cual definimos  $\Delta t_3^+$  y  $\Delta t_3^-$  en cada una de ellas respectivamente. De esta forma

$$\begin{aligned} &\sum_{\gamma, \zeta} e^{-i(\mathbf{p}'+\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_\gamma} e^{i(\mathbf{p}'-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{R}_\zeta} \\ &= 2 \cos(\mathbf{p}_x a + \mathbf{q}_x a + \mathbf{p}'_y a + \mathbf{q}_y a) + 2 \cos(\mathbf{p}'_x a + \mathbf{q}_x a + \mathbf{p}_y a + \mathbf{q}_y a) + \\ &2 \cos(\mathbf{p}_x a + \mathbf{q}_x a - \mathbf{p}'_y a - \mathbf{q}_y a) + 2 \cos(\mathbf{p}'_x a + \mathbf{q}_x a - \mathbf{p}_y a - \mathbf{q}_y a) \end{aligned} \quad (209)$$

y obtenemos

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\Delta t_3} = & \Delta t_3^+ \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} [2 \cos(p_x a + q_x a + p'_y a + q_y a) + \\
& 2 \cos(p'_x a + q_x a + p_y a + q_y a)] c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \sigma'} + \\
& \Delta t_3^- \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} [2 \cos(p_x a + q_x a + p'_y a + q_y a) + \\
& 2 \cos(p'_x a + q_x a + p_y a + q_y a)] c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \sigma'}, \quad (210)
\end{aligned}$$

utilizando la anticonmutación de los operadores

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{\Delta t_3} = & \Delta t_3^+ \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma} [2 \cos(p_x a + q_x a - p_y a + q_y a) + \\
& 2 \cos(-p_x a + q_x a + p_y a + q_y a)] c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma} \\
& - \Delta t_3^+ \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} [2 \cos(p_x a + q_x a + p'_y a + q_y a) + \\
& 2 \cos(p'_x a + q_x a + p_y a + q_y a)] c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \sigma'} + \\
& \Delta t_3^- \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \sigma} [2 \cos(p_x a + q_x a + p_y a - q_y a) + \\
& 2 \cos(-p_x a + q_x a - p_y a - q_y a)] c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma} \\
& - \Delta t_3^- \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} [2 \cos(p_x a + q_x a - p'_y a - q_y a) + \\
& 2 \cos(p'_x a + q_x a - p_y a - q_y a)] c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \sigma'}. \quad (211)
\end{aligned}$$

Observamos que

$$\begin{aligned}
& \cos(p_x a - p_y a + q_x a + q_y a) \\
= & \cos(p_x a - p_y a) \cos(q_x a + q_y a) - \sin(p_x a - p_y a) \sin(q_x a + q_y a), \quad (212)
\end{aligned}$$

pero además

$$\begin{aligned}
& \cos(-p_x a + p_y a + q_x a + q_y a) \\
= & \cos(-p_x a + p_y a) \cos(q_x a + q_y a) - \sin(-p_x a + p_y a) \sin(q_x a + q_y a) \\
= & \cos(p_x a - p_y a) \cos(q_x a + q_y a) + \sin(p_x a - p_y a) \sin(q_x a + q_y a). \quad (213)
\end{aligned}$$

Sumando estos dos términos nos queda

$$\begin{aligned} & \cos(p_x a - p_y a + q_x a + q_y a) + \cos(-p_x a + p_y a + q_x a + q_y a) \\ = & 2 \cos(p_x a - p_y a) \cos(q_x a + q_y a), \end{aligned} \quad (214)$$

al extender la suma sobre  $\mathbf{q}$  en la Ec. (211) a una integral en la primera zona de Brillouin obtenemos que el término  $\cos(q_x a + q_y a)$  se anula ya que

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{q}} \cos(q_x a + q_y a) &= \sum_{q_x} \cos(q_x a) \sum_{q_y} \cos(q_y a) - \sum_{q_x} \sin(q_x a) \sum_{q_y} \sin(q_y a) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (215)$$

Análogamente para los términos

$$\begin{aligned} & \cos(p_x a + q_x a + p_y a - q_y a) \\ = & \cos(p_x a + p_y a) \cos(q_x a - q_y a) - \sin(p_x a + p_y a) \sin(q_x a - q_y a), \end{aligned} \quad (216)$$

$$\begin{aligned} & \cos(-p_x a + q_x a - p_y a - q_y a) \\ = & \cos(p_x a + p_y a) \cos(q_x a - q_y a) + \sin(p_x a + p_y a) \sin(q_x a - q_y a), \end{aligned} \quad (217)$$

$$\begin{aligned} & \cos(p_x a + p_y a + q_x a - q_y a) + \cos(-p_x a - p_y a + q_x a - q_y a) \\ = & 2 \cos(p_x a + p_y a) \cos(q_x a - q_y a). \end{aligned} \quad (218)$$

Por los mismos argumentos que antes al extender la suma a una integral el término  $\cos(q_x a - q_y a)$  se anula. Finalmente nos quedan los términos de cuatro operadores donde  $\{c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q},\sigma} c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q},\sigma'}\} = 0$ , así que

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Delta t_3} &= \Delta t_3^+ \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} [2 \cos(p_x a + q_x a + p'_y a + q_y a) + \\ & + 2 \cos(p'_x a + q_x a + p_y a + q_y a)] c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q},\sigma'} c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q},\sigma} \\ & + \Delta t_3^- \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} [2 \cos(p_x a + q_x a - p'_y a - q_y a) + \\ & 2 \cos(p'_x a + q_x a - p_y a - q_y a)] c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{p}'+\mathbf{q},\sigma'} c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q},\sigma}. \end{aligned} \quad (219)$$

cambiando los índices  $\mathbf{k} = \mathbf{p}$ ,  $\mathbf{k}' = \mathbf{p}'$  obtenemos finalmente

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{\Delta t_3} = & \Delta t_3^+ \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} [2 \cos(k_x a + q_x a + k'_y a + q_y a)] + \\
 & + 2 \cos(k'_x a + q_x a + k_y a + q_y a)] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} \\
 & + \Delta t_3^- \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} [2 \cos(k_x a + q_x a - k'_y a - q_y a) + \\
 & 2 \cos(k'_x a + q_x a - k_y a - q_y a)] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma}. \quad (220)
 \end{aligned}$$

Observemos que para el caso triplete de espines iguales deberemos de considerar la restricción  $\sigma = \sigma'$  por lo que podemos dividir los términos en

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{\Delta t_3} = & \Delta t_3^+ \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma \neq \sigma'}} [2 \cos(k_x a + q_x a + k'_y a + q_y a) + \\
 & + 2 \cos(k'_x a + q_x a + k_y a + q_y a)] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} + \\
 & \Delta t_3^+ \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma}} [2 \cos(k_x a + q_x a + k'_y a + q_y a) + \\
 & + 2 \cos(k'_x a + q_x a + k_y a + q_y a)] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} \\
 & + \Delta t_3^- \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma \neq \sigma'}} [2 \cos(k_x a + q_x a - k'_y a - q_y a) + \\
 & 2 \cos(k'_x a + q_x a - k_y a - q_y a)] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} + \\
 & + \Delta t_3^- \frac{1}{N_s} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma}} [2 \cos(k_x a + q_x a - k'_y a - q_y a) + \\
 & 2 \cos(k'_x a + q_x a - k_y a - q_y a)] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma}. \quad (221)
 \end{aligned}$$

Los coeficientes de los términos con la restricción  $\sigma \neq \sigma'$  corresponden al potencial de espines antiparalelos considerados en la Ec. (170), mientras que los de mismos espines se consideran en la Ec. (170).

## Apéndice B

### Estados de Dos Partículas

En esta sección desarrollaremos con todo detalle la solución del problema de dos partículas en una red cuadrada. Los estados correspondientes forman una red cúbica en un hiper-espacio de cuatro dimensiones que puede ser proyectada usando el método de mapeo discutido en la sección 1.3. La red resultante puede ser numerada por capas como se muestra en la siguiente figura para las primeras tres capas.

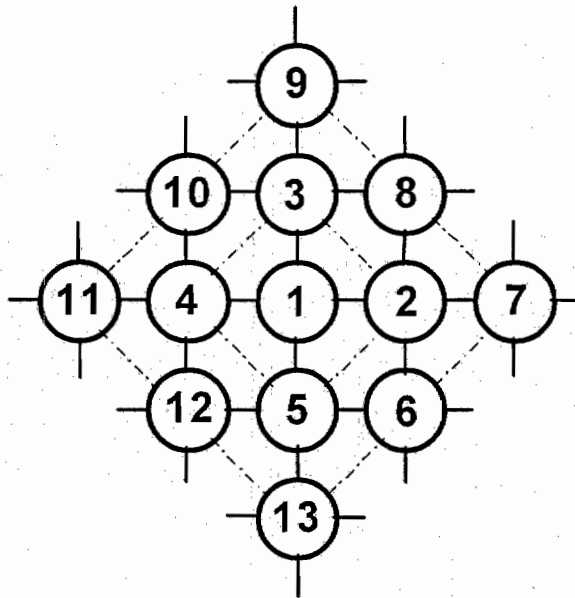


Figura B.1 Numeración de los 13 primeros sitios de la red cuadrada derivada de una proyección de un hipercubo tetra-dimensional. Las líneas punteadas indican las capas consideradas para el conteo de los estados proyectados.

De acuerdo al hamiltoniano de Hubbard [Ec. (14)], la matriz de dicho hamiltoniano correspondiente para los 13 primeros sitios puede expresarse como se muestra en la Ec. (222), siguiendo la misma nomenclatura de la sección 1.3. Para el caso de dos huecos, se hace la consideración de los saltos efectivos señalados en la ecuación (16).

Los resultados de la diagonalización de la matriz expresada en la Ec. (222) para un sistema de 421 sitios proyectados -correspondiente a 14 capas- se muestran en

las tablas 1 y 2 para electrones y huecos respectivamente. La sección (a) de la tabla 1 corresponde a la red cuadrada sin distorsión, mientras que la sección (b) corresponde a la red con distorsión. Obsérvese que para el caso de electrones en la red sin distorsión los estados degenerados con simetría  $p$  se encuentran cercanos al estado base con simetría  $s$ . Al introducir la distorsión dichos estados  $p$  se desdoblan y uno de ellos se convierte en el estado base. En cambio dicho proceso no conduce a un nuevo estado base, ya que en este caso los estados degenerados  $p$  se encuentran lejos del estado base con simetría  $d$ . Cabe mencionar que las funciones de onda de los estados degenerados  $p$  en las tablas 1 y 2 corresponden a una base particular ya que cualquier combinación lineal de estas función de onda sigue siendo una solución del problema. Por otro lado, podemos observar en la tabla 2 que existen capas enteras con amplitud cero para los estados con simetría  $d$  y  $p$ , sin embargo hemos verificado que las amplitudes de la siguiente capa no son ceros, por lo cual podríamos decir que son nodos de capas.

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} U & \beta_x^{imp} & \beta_y^{imp} & \beta_x^{imp} & \beta_y^{imp} & \beta_- & 0 & \beta_+ & 0 & \beta_- & 0 & \beta_+ & 0 \\ \beta_x^{imp} & V & \beta_-^{imp} & 0 & \beta_+^{imp} & \beta_y & \beta_x & \beta_y & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_y^{imp} & \beta_-^{imp} & V & \beta_+^{imp} & 0 & 0 & 0 & \beta_x & \beta_y & \beta_x & 0 & 0 & 0 \\ \beta_x^{imp} & 0 & \beta_+^{imp} & V & \beta_-^{imp} & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_y & \beta_x & \beta_y & 0 \\ \beta_y^{imp} & \beta_+^{imp} & 0 & \beta_-^{imp} & V & \beta_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_x & \beta_y \\ \beta_- & \beta_y & 0 & 0 & \beta_x & 0 & \beta_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_+ \\ 0 & \beta_x & 0 & 0 & 0 & \beta_+ & 0 & \beta_- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_+ & \beta_y & \beta_x & 0 & 0 & 0 & \beta_- & 0 & \beta_- & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_y & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_- & 0 & \beta_+ & 0 & 0 & 0 \\ \beta_- & 0 & \beta_x & \beta_y & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_+ & 0 & \beta_+ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_+ & 0 & \beta_- & 0 \\ \beta_+ & 0 & 0 & \beta_y & \beta_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_- & 0 & \beta_- \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_y & \beta_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_- & 0 \end{bmatrix} \quad (222)$$

						(a)
U= 10	V= 0		T= 1			
DIS= 0	DIS3= 0		TP= 0.45			
TPA= 0.45	TPB= 0.45					
DELTA0= 0.5	DELTA30= 0.1					
DELTA30A= 0.1	DELTA30B= 0.1					
TEF= 1	TPEFA= 0.45		TPEFB= 0.45			
valores	propios:					
	-4.3857322	-4.3736471	-4.3736471	-4.3598144	-4.3422707	-4.3332086
1	-0.0298253	0	0	0	0	-0.0418352
2	0.0579948	-0.0314634	-0.0000025	0.0073938	0	0.0802974
3	0.0579948	0.0000025	-0.0314634	-0.0073938	0	0.0802974
4	0.0579948	0.0314634	0.0000025	0.0073938	0	0.0802974
5	0.0579948	-0.0000025	0.0314634	-0.0073938	0	0.0802974
6	-0.0741331	0.0308779	-0.0308779	0	-0.013355	-0.1010937
7	-0.0705823	0.0601531	0.0000047	-0.0207268	0	-0.0851014
8	-0.0741331	0.0308779	0.0308779	0	0.013355	-0.1010937
9	-0.0705823	-0.0000047	0.0601531	0.0207268	0	-0.0851014
10	-0.0741331	-0.0308779	0.0308779	0	-0.013355	-0.1010937
11	-0.0705823	-0.0601531	-0.0000047	-0.0207268	0	-0.0851014
12	-0.0741331	-0.0308779	-0.0308779	0	0.013355	-0.1010937
13	-0.0705823	0.0000047	-0.0601531	0.0207268	0	-0.0851014
						(b)
U= 10	V= 0		T= 1			
DIS= 5.00E-02	DIS3= 1.00E-02		TP= 0.45			
TPA= 0.5	TPB= 0.4					
DELTA0= 0.5	DELTA30= 0.1					
DELTA30A= 0.11	DELTA30B= 9.00E-02					
TEF= 1	TPEFA= 0.5		TPEFB= 0.4			
valores	propios:					
	-4.3874436	-4.386511	-4.3716739	-4.3610015	-4.3607436	-4.3538644
1	0	-0.0244418	-0.0357857	0	0	0
2	-0.025913	0.0481231	0.0682433	0.0239714	-0.0085552	-0.0167082
3	-0.025913	0.0481231	0.0682433	-0.0239714	0.0085552	0.0167082
4	0.025913	0.0481231	0.0682433	-0.0239714	-0.0085552	0.0167082
5	0.025913	0.0481231	0.0682433	0.0239714	0.0085552	-0.0167082
6	0	-0.0571844	-0.0912362	-0.0478893	0	0.0355633
7	0.0481223	-0.0619033	-0.0719959	-0.0458803	0.0237384	0.0256961
8	0.0498518	-0.0671747	-0.0793207	0	0	0
9	0.0481223	-0.0619033	-0.0719959	0.0458803	-0.0237384	-0.0256961
10	0	-0.0571844	-0.0912362	0.0478893	0	-0.0355633
11	-0.0481223	-0.0619033	-0.0719959	0.0458803	0.0237384	-0.0256961
12	-0.0498518	-0.0671747	-0.0793207	0	0	0
13	-0.0481223	-0.0619033	-0.0719959	-0.0458803	-0.0237384	0.0256961

Tabla B.1 Los valores y vectores propios para dos electrones en 421 estados proyectados de (a) una red cuadrada normal y (b) una con distorsión.



(a)						
U=	10	V=	0	T=	1	
DIS=	0	DIS3=	0	TP=	0.45	
TPA=	0.45	TPB=	0.45			
DELTA0=	0.5	DELTA30=	0.1			
DELTA30A=	0.1	DELTA30B=	0.1			
TEF=	0	TPEFA=	5.00E-02	TPEFB=	5.00E-02	
valores	propios:					
	-0.6411583	-0.3889817	-0.3823044	-0.380933	-0.380933	-0.3783386
1	0	-0.0045483	0	0	0	0
2	-0.4779367	0.0048541	-0.0373473	0	0	-0.0251435
3	0.4779367	0.0048541	0.0373473	0	0	0.029799
4	-0.4779367	0.0048541	-0.0373473	0	0	0.0251435
5	0.4779367	0.0048541	0.0373473	0	0	-0.029799
6	0	0.0695899	0	-0.0338248	0.0338248	0
7	0	-0.0861582	0	0	-0.0663496	0
8	0	0.0695899	0	0.0338248	0.0338248	0
9	0	-0.0861582	0	-0.0663496	0	0
10	0	0.0695899	0	0.0338248	-0.0338248	0
11	0	-0.0861582	0	0	0.0663496	0
12	0	0.0695899	0	-0.0338248	-0.0338248	0
13	0	-0.0861582	0	0.0663496	0	0
(b)						
U=	10	V=	0	T=	1	
DIS=	0.12	DIS3=	1.00E-02	TP=	0.45	
TPA=	0.57	TPB=	0.33			
DELTA0=	0.5	DELTA30=	0.1			
DELTA30A=	0.11	DELTA30B=	9.00E-02			
TEF=	0	TPEFA=	0.13	TPEFB=	-3.00E-02	
valores	propios:					
	-0.7176516	-0.6298939	-0.6239278	-0.6208739	-0.6161708	-0.6084327
1	0	0	-0.0047719	0	0	0
2	-0.4409881	0.1810125	0.0046994	0	-0.0462673	-0.1322691
3	0.4409881	0.1810125	0.0046994	0	0.0462673	-0.1322691
4	-0.4409881	-0.1810125	0.0046994	0	-0.0462673	0.1322691
5	0.4409881	-0.1810125	0.0046994	0	0.0462673	0.1322691
6	0	0	-0.0777236	-0.0478354	0	0
7	0	0	0.0806528	0.0469163	0	0
8	0	0	0.0434077	0	0	0
9	0	0	0.0806528	-0.0469163	0	0
10	0	0	-0.0777236	0.0478354	0	0
11	0	0	0.0806528	-0.0469163	0	0
12	0	0	0.0434077	0	0	0
13	0	0	0.0806528	0.0469163	0	0

Tabla B.2 Los valores y vectores propios para dos huecos en 421 estados proyectados de (a) una red cuadrada normal y (b) una con distorsión.

## Apéndice C

### Apareamiento en el Espacio Recíproco

En este apéndice se discute algunas soluciones analíticas de la energía de amarre del par de electrones con espín singlete y triplete para potenciales isotrópicos y del tipo  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'$ .

#### C.1 Apareamiento con espín singlete

Vimos en la sección 2.1, que los coeficientes de la función de onda del par singlete [Ec. (29)] satisfacen la propiedad  $A(\mathbf{k}) = A(-\mathbf{k})$ . El hamiltoniano que describe el sistema está dado por la Ec. (30) y podemos encontrar  $E = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle_S$ . Evaluando  $\hat{H} | \Phi \rangle_S$ , obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{H} | \Phi \rangle_S = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'', \sigma} A(\mathbf{k}'') \varepsilon_0(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger | 0 \rangle + \\ & \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \mathbf{k}'' \\ \sigma, \sigma'}} A(\mathbf{k}'') V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'} c_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (223)$$

aplicamos las propiedades de anticonmutación para fermiones, por lo cual

$$\begin{aligned} \hat{H} | \Phi \rangle_S = & \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'', \sigma} A(\mathbf{k}'') \varepsilon_0(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}''} \delta_{\sigma, \uparrow} - c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma}) c_{-\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger | 0 \rangle + \\ & \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \mathbf{k}'' \\ \sigma, \sigma'}} A(\mathbf{k}'') V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'} (\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}''} \delta_{\sigma, \uparrow} - c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma}) c_{-\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (224)$$

entonces

$$\begin{aligned} \hat{H} | \Phi \rangle_S = & \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}) \varepsilon_0(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger | 0 \rangle - \sum_{\mathbf{k}} A(-\mathbf{k}) \varepsilon_0(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger | 0 \rangle + \\ & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma'} A(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger (\delta_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, -\mathbf{k}} \delta_{\sigma', \downarrow} - c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'}) | 0 \rangle - \\ & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma'} A(-\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (225)$$

Usando  $A(\mathbf{k}) = A(-\mathbf{k})$  obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Phi\rangle_S &= \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k})\varepsilon_0(\mathbf{k})c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger|0\rangle - \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k})\varepsilon_0(\mathbf{k})c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger|0\rangle + \\ &\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} A(\mathbf{k})V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{q}}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\downarrow}^\dagger|0\rangle - \\ &\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\sigma'} A(\mathbf{k})V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger (\delta_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},-\mathbf{k}}\delta_{\sigma',\uparrow} - c_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'})|0\rangle, \end{aligned} \quad (226)$$

por lo cual

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Phi\rangle_S &= \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k})\varepsilon_0(\mathbf{k})c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger|0\rangle - \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k})\varepsilon_0(\mathbf{k})c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger|0\rangle + \\ &\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} A(\mathbf{k})V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{q}}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\downarrow}^\dagger|0\rangle - \\ &\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} A(\mathbf{k})V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{q}}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\uparrow}^\dagger|0\rangle. \end{aligned} \quad (227)$$

Ahora completamos el bra-ket y usamos propiedades de anticonmutación

$$\begin{aligned} \langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle_S &= \langle 0|\sum_{\mathbf{k}} A^*(\mathbf{k})A(\mathbf{k})\varepsilon_0(\mathbf{k})c_{-\mathbf{k},\downarrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger|0\rangle + \\ &\langle 0|\sum_{\mathbf{k}} A^*(\mathbf{k})A(\mathbf{k})\varepsilon_0(\mathbf{k})c_{\mathbf{k},\downarrow}c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger|0\rangle + \\ &\frac{1}{2}\langle 0|\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{q}} A^*(\mathbf{k}+\mathbf{q})A(\mathbf{k})V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{q}}c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\downarrow}c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\downarrow}^\dagger|0\rangle + \\ &\frac{1}{2}\langle 0|\sum_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{q}} A^*(-(\mathbf{k}+\mathbf{q}))A(\mathbf{k})V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{q}}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^\dagger|0\rangle \end{aligned} \quad (228)$$

entonces

$$\begin{aligned} \langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle_S &= 2 \sum_{\mathbf{k}} A^*(\mathbf{k})A(\mathbf{k})\varepsilon_{\mathbf{k}}\langle 0|0\rangle + \\ &\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{q}} A^*(\mathbf{k}+\mathbf{q})A(\mathbf{k})V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{q}}\langle 0|0\rangle + \\ &\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{q}} A^*(\mathbf{k}+\mathbf{q})A(\mathbf{k})V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{q}}\langle 0|0\rangle. \end{aligned} \quad (229)$$

Haciendo el cambio de variable  $\mathbf{k}' = (\mathbf{k} + \mathbf{q})$  obtenemos manteniendo implícita la suma sobre  $\mathbf{q}$

$$\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle_S = 2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} |A(\mathbf{k})|^2 + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} A^*(\mathbf{k}') A(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}', \mathbf{q}} \quad (230)$$

De esta ecuación deseamos buscar alguna condición de energía mínima, por lo que podemos buscar los puntos críticos para  $E$  con respecto a  $A^*(\mathbf{k})$  por el método de Lagrange

$$\frac{\partial E}{\partial A^*(\mathbf{k})} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) \frac{\partial A(\mathbf{k}) A^*(\mathbf{k})}{\partial A^*} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{\partial A^*(\mathbf{k}) A(\mathbf{k}')}{\partial A^*} V_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}', \mathbf{q}} = \lambda A^*(\mathbf{k}), \quad (231)$$

$$\Rightarrow 2\varepsilon(\mathbf{k}) \frac{\partial A(\mathbf{k}) A^*(\mathbf{k})}{\partial A^*} + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\partial A^*(\mathbf{k}) A(\mathbf{k}')}{\partial A^*} V_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}', \mathbf{q}} = \lambda A^*(\mathbf{k}), \quad (232)$$

$$\Rightarrow 2\varepsilon(\mathbf{k}) A(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} A(\mathbf{k}') V_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}', \mathbf{q}} = \lambda A^*(\mathbf{k}), \quad (233)$$

$$\Rightarrow [2\varepsilon(\mathbf{k}) - \lambda] A(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} A(\mathbf{k}') V_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}', \mathbf{q}} = 0, \quad (234)$$

donde el parámetro  $\lambda$  representa a la energía del par enlazado. Por lo tanto,

$$[2\varepsilon(\mathbf{k}) - \lambda] A(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}'} A(\mathbf{k}') V_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}', \mathbf{q}}. \quad (235)$$

En general, esta ecuación no es fácil de resolver. Sin embargo, considerando el caso más simple en el que  $V_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}', \mathbf{q}}$  sea constante negativa ( $-V_1$ ) que representa una interacción atractiva entre los electrones con energías entre el nivel de Fermi y ésta más la máxima energía fonónica (frecuencia de Debye), la ecuación (235) se convierte en

$$[2\varepsilon(\mathbf{k}) - \lambda] A(\mathbf{k}) = V_1 \sum_{\mathbf{k}'} A(\mathbf{k}'), \quad (236)$$

donde la suma sobre  $\mathbf{k}'$  toma en cuenta la condición sobre la energía electrónica discutida anteriormente. Obsérvese que  $V_1 \sum_{\mathbf{k}'} A(\mathbf{k}') = a$  es una constante y sustituyendo en la ecuación (236), obtenemos

$$[2\varepsilon(\mathbf{k}) - \lambda] \frac{a}{2\varepsilon(\mathbf{k}) - \lambda} = V_1 \sum_{\mathbf{k}'} \frac{a}{2\varepsilon(\mathbf{k}') - \lambda}, \quad (237)$$

entonces

$$a = V_1 \sum_{\mathbf{k}'} \frac{a}{2\varepsilon(\mathbf{k}') - \lambda}. \quad (238)$$

El caso de interacción mediante fonones, esta última ecuación puede reescribirse como una integral

$$1 = V_1 N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon'}{2\varepsilon' - \lambda}, \quad (239)$$

donde  $\omega_D$  es la frecuencia de Debye, con lo cual

$$\frac{2}{N(0) V_1} = \ln\left(\frac{2\hbar\omega_D - \lambda}{-\lambda}\right), \quad (240)$$

o bien

$$\lambda \left[ 1 - \exp\left(\frac{2}{N(0) V_1}\right) \right] = -2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{2}{N(0) V_1}\right), \quad (241)$$

en el acoplamiento débil  $N(0) V_1 \ll 1$ , por lo que

$$\lim_{N(0) V_1 \rightarrow 0} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{2}{N(0) V_1}\right) \right] \rightarrow 1, \quad (242)$$

lo cual nos dice que la energía del estado del par de electrones con espín singulete ( $E_S$ ) por debajo del nivel de Fermi es

$$E_S = \lambda = -2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{2}{N(0) V_1}\right). \quad (243)$$

## C.2 Apareamiento con Espín Triplete

Para este caso, cada par está formado por los estados  $\mathbf{k}, \uparrow$  y  $-\mathbf{k}, \uparrow$ , por lo cual, para no considerar dos veces el mismo par, la sumatoria de  $|\Phi\rangle_T$  [Ec. (32)] deberá de correr solamente sobre la mitad de la primera zona de Brillouin, aunado con la propiedad de antisimetría de los coeficientes de expansión  $A(\mathbf{k}) = -A(-\mathbf{k})$ . La evaluación de  $\hat{H}|\Phi\rangle_T$  nos lleva a

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Phi\rangle_T &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}''}^{1BZ/2} A(\mathbf{k}'') \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger |0\rangle + \\ &\frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\mathbf{k}''}^{1BZ/2} A(\mathbf{k}'') V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'} c_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger |0\rangle, \end{aligned} \quad (244)$$

usando las propiedades de anticonmutación obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Phi\rangle_T = & 2 \sum_{\mathbf{k}}^{1BZ/2} A(\mathbf{k}) \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger |0\rangle + \\ & \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{k}}^{1BZ/2} A(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\uparrow}^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (245)$$

y redefiniendo el índice  $\mathbf{k}' = (\mathbf{k} + \mathbf{q})$ , se tiene que

$$\begin{aligned} \hat{H}|\Phi\rangle_T = & 2 \sum_{\mathbf{k}}^{1BZ/2} A(\mathbf{k}) \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger |0\rangle + \\ & \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}}^{1BZ/2} A(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k},-\mathbf{k}',\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}',\uparrow}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (246)$$

Completando el bra-ket y usando propiedades de anticonmutación, finalmente obtenemos

$$\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle_T = 4 \sum_{\mathbf{k}}^{1BZ/2} A^*(\mathbf{k}) A(\mathbf{k}) \varepsilon_{\mathbf{k}} \langle 0 | 0 \rangle + 2 \sum_{\mathbf{k}'}^{1BZ/2} \sum_{\mathbf{k}}^{1BZ/2} A^*(\mathbf{k}') A(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k},-\mathbf{k}',\mathbf{q}} \langle 0 | 0 \rangle. \quad (247)$$

Observamos que el resultado es similar que para el caso singulete [Ec. (230)], por lo cual, podemos proceder de la misma forma para llegar a

$$[2\varepsilon(\mathbf{k}) - \lambda] A(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} A(\mathbf{k}') V_{\mathbf{k},-\mathbf{k}',\mathbf{q}} = 0. \quad (248)$$

Para el caso de que  $V_{\mathbf{k},-\mathbf{k}',\mathbf{q}}$  es una constante negativa  $-V_1$ ,

$$[2\varepsilon(\mathbf{k}) - \lambda] A(\mathbf{k}) = V_1 \sum_{\mathbf{k}'} A(\mathbf{k}'), \quad (249)$$

obtenemos una solución trivial para  $A(\mathbf{k})$ , ya que la suma  $\sum_{\mathbf{k}'} A(\mathbf{k}')$  se anula por la antisimetría de  $A(\mathbf{k}')$ .

En cambio, para el caso de que el potencial de interacción depende del ángulo entre  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$ , es decir,

$$V_{\mathbf{k},-\mathbf{k}',\mathbf{q}} = -V_1 - V_2 \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{|\mathbf{k}| |\mathbf{k}'|}, \quad (250)$$

donde  $V_1$  y  $V_2$  son constantes positivas. Por lo tanto, sustituyendo este potencial en la Ec (248) y transformando la suma a integral, llegamos a la ecuación

$$\begin{aligned} [2\varepsilon(\mathbf{k}) - \lambda] A(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{k}'} [V_1 + V_2 \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{|\mathbf{k}| |\mathbf{k}'|}] A(\mathbf{k}') \\ &= V_2 \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \cdot \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}'|} A(\mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (251)$$

En esta última ecuación, la suma del primer término es cero ya que  $A(\mathbf{k}')$  es antisimétrica. Definiendo

$$\mathbf{a} = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}'|} A(\mathbf{k}') \quad (252)$$

y sustituyendo en la Ec. (251) obtenemos

$$A(\mathbf{k}) = V_2 \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}}{|\mathbf{k}| [2\varepsilon(\mathbf{k}) - \lambda]}. \quad (253)$$

Ahora, sustituimos la Ec. (253) en la Ec. (251) obtenemos la expresión

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{a} = V_2 \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{|\mathbf{k}'|^2} \frac{\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}}{[2\varepsilon(\mathbf{k}') - \lambda]}. \quad (254)$$

Convirtiendo la suma a una integral y considerando interacción electrón-electrón vía fonón, obtenemos

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{a} = N(0) V_2 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon'}{[2\varepsilon' - \lambda]} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a})}{|\mathbf{k}'|^2} \frac{d\Omega'}{4\pi}. \quad (255)$$

Sean  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$  y  $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$ , además expresando  $\mathbf{k}'$  en coordenadas esféricas, se tiene que

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}')(\mathbf{k}' \cdot \mathbf{a})}{|\mathbf{k}'|^2} \frac{d\Omega'}{4\pi} \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^{\pi} d\theta' \frac{\sin \theta'}{4\pi} (k_x \sin \theta' \cos \varphi' + k_y \sin \theta' \sin \varphi' + k_z \cos \theta') \times \\ & \quad (a_x \sin \theta' \cos \varphi' + a_y \sin \theta' \sin \varphi' + a_z \cos \theta') \\ &= \frac{1}{3} (k_x a_x + k_y a_y + k_z a_z), \end{aligned} \quad (256)$$

por lo tanto,

$$\begin{aligned} 3 &= N(0)V_2 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon'}{[2\varepsilon' - \lambda]} \\ &= \frac{1}{2}N(0)V_2 \ln\left(\frac{2\hbar\omega_D - \lambda}{-\lambda}\right), \end{aligned} \quad (257)$$

o bien

$$\lambda \left[ 1 - \exp\left(-\frac{6}{N(0)V_2}\right) \right] = -2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{6}{N(0)V_2}\right). \quad (258)$$

Nuevamente, para el caso de acoplamiento débil [ $N(0)V_2 \ll 1$ ] nos lleva a la energía del par con espín triplete ( $E_T$ )

$$E_T = \lambda = -2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{6}{N(0)V_2}\right). \quad (259)$$

### C.3 Caso general

Por último, presentaremos un análisis sobre la energía del estado enlazado de un par con espín singulete, donde  $A(\mathbf{k}) = A(-\mathbf{k})$ , partiendo de un potencial del tipo triplete [Ec.(250)] y de la Ec (235)

$$[2\varepsilon(\mathbf{k}) - \lambda] A(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} V_1 A(\mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{V_2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' A(\mathbf{k}')}{|\mathbf{k}| |\mathbf{k}'|}. \quad (260)$$

Siguiendo el mismo camino expuesto anteriormente, obtenemos

$$1 = N(0) V_1 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{[2\varepsilon - \lambda]} d\varepsilon + \frac{1}{3} N(0) V_2 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon'}{[2\varepsilon' - \lambda]}, \quad (261)$$

lo que da una solución del tipo

$$1 = \frac{N(0) V_1}{2} \ln\left(\frac{\hbar\omega_D - \lambda}{-\lambda}\right) + \frac{N(0) V_2}{6} \ln\left(\frac{2\hbar\omega_D - \lambda}{-\lambda}\right), \quad (262)$$

por lo cual

$$\lambda(1 - e^{-\frac{6}{N(0)(3V_1+V_2)}}) = -2\hbar\omega_D e^{-\frac{6}{N(0)(3V_1+V_2)}}, \quad (263)$$



en la cual nuevamente para el caso de acoplamiento débil  $N(0) (3V_1 + V_2) \ll 1$ , la energía del estado apareado con espín singlete se reduce a ( $E'_S$ )

$$E'_S = \lambda = -2\hbar\omega_D e^{-\frac{6}{N(0)(3V_1+V_2)}}. \quad (264)$$

En este resultado contemplamos las soluciones singlete y triplete encontradas anteriormente, dependiendo de los valores de  $V_1$  y  $V_2$ . Para el caso singlete se había supuesto  $V_2 = 0$  y recuperamos la ecuación Ec. (243), mientras que para el caso triplete la antisimetría de  $A(\mathbf{k})$  anula la primer integral y por ende a  $V_1$  obteniéndose la Ec. (259).

## Apéndice D

### Energía del Estado Triplete

En general, la función de onda que contiene únicamente pares con espines paralelos puede expresarse como

$$|\Psi\rangle = \prod_{\mathbf{k}}^{1BZ/2} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger}c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger})(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}c_{\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger})|0\rangle. \quad (265)$$

Además, consideremos el siguiente hamiltoniano

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int} \quad (266)$$

donde

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_0(\mathbf{k})c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (267)$$

y

$$\hat{H}_{int} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma,\sigma'} W_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}c_{-\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger}c_{-\mathbf{k}',\sigma'}c_{\mathbf{k}',\sigma}. \quad (268)$$

#### D.1 Término $\langle\Psi|\hat{H}_0|\Psi\rangle$

Partiendo de las Ecs (267), (265) y utilizando las propiedades de anticonmutación obtenemos

$$\begin{aligned} & \langle\Psi|\hat{H}_0|\Psi\rangle \\ &= \langle 0| \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}}^{1BZ/2} (u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'}c_{\mathbf{k}',\downarrow}c_{-\mathbf{k}',\downarrow})(u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'}c_{\mathbf{k}',\uparrow}c_{-\mathbf{k}',\uparrow}) \times \\ & \quad \prod_{\mathbf{k}'' \neq \mathbf{k}}^{1BZ/2} (u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''}c_{-\mathbf{k}'',\uparrow}^{\dagger}c_{\mathbf{k}'',\uparrow}^{\dagger})(u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''}c_{-\mathbf{k}'',\downarrow}^{\dagger}c_{\mathbf{k}'',\downarrow}^{\dagger}) \times \\ & \quad \sum_{\mathbf{k},\sigma} (u_{\mathbf{k}}^2 + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k},\uparrow}c_{-\mathbf{k},\uparrow} + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k},\downarrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow} + v_{\mathbf{k}}^2c_{\mathbf{k},\downarrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow}c_{\mathbf{k},\uparrow}c_{-\mathbf{k},\uparrow}) \left[ \varepsilon_0(\mathbf{k})c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}c_{\mathbf{k},\sigma} \right] \times \\ & \quad (u_{\mathbf{k}}^2 + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}c_{\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}c_{-\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger}c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} + 2v_{\mathbf{k}}^2c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger}c_{-\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger}c_{\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger})|0\rangle. \end{aligned} \quad (269)$$

A continuación, demostraremos que el operador

$$\hat{O} \equiv \prod_{\substack{1BZ/2 \\ k' \neq k}} (u_{k'} + v_{k'} c_{k', \downarrow} c_{-k', \downarrow}) (u_{k'} + v_{k'} c_{k', \uparrow} c_{-k', \uparrow}) \times \prod_{\substack{1BZ/2 \\ k'' \neq k}} (u_{k''} + v_{k''} c_{-k'', \uparrow}^{\dagger} c_{k'', \uparrow}^{\dagger}) (u_{k''} + v_{k''} c_{-k'', \downarrow}^{\dagger} c_{k'', \downarrow}^{\dagger}), \quad (270)$$

es el operador unidad, es decir, aplicado al estado vacío ( $\langle 0|$ ) da

$$\langle 0|\hat{O} = \langle 0|. \quad (271)$$

Para demostrar esta propiedad, iniciamos reacomodando las productorias en la Ec. (270), pudiendo expresar a  $\hat{O}$  como

$$\hat{O} = \prod_{\substack{1BZ/2 \\ k' \neq k}} (u_{k'}^2 + u_{k'} v_{k'} c_{k', \uparrow} c_{-k', \uparrow} + u_{k'} v_{k'} c_{k', \downarrow} c_{-k', \downarrow} + v_{k'}^2 c_{k', \downarrow} c_{-k', \downarrow} c_{k', \uparrow} c_{-k', \uparrow}) \times (u_{k'}^2 + u_{k'} v_{k'} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger} + u_{k'} v_{k'} c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} + v_{k'}^2 c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger}) \quad (272)$$

y desarrollando los paréntesis, obtenemos

$$\hat{O} = \prod_{\substack{1BZ/2 \\ k' \neq k}} (u_{k'}^4 + u_{k'}^2 u_{k'} v_{k'} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger} + u_{k'} v_{k'} v_{k'}^2 c_{k', \uparrow} c_{-k', \uparrow} c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger} + u_{k'}^2 u_{k'} v_{k'} c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} + v_{k'}^2 u_{k'} v_{k'} c_{k', \downarrow} c_{-k', \downarrow} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger} c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} + u_{k'}^2 v_{k'}^2 c_{k', \downarrow} c_{-k', \downarrow} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger} + u_{k'}^2 v_{k'}^2 c_{k', \uparrow} c_{-k', \uparrow} c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} + u_{k'}^2 v_{k'}^2 c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger} + v_{k'}^4 c_{k', \downarrow} c_{-k', \downarrow} c_{k', \uparrow} c_{-k', \uparrow} c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger}), \quad (273)$$

el cual al aplicarse al  $\langle 0|$ , puede simplificarse a

$$\langle 0|\hat{O} = \langle 0| \prod_{\substack{1BZ/2 \\ k' \neq k}} (u_{k'}^4 + u_{k'} v_{k'} v_{k'}^2 c_{k', \uparrow} c_{-k', \uparrow} c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger} + v_{k'}^2 u_{k'} v_{k'} c_{k', \downarrow} c_{-k', \downarrow} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger} c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} + u_{k'}^2 v_{k'}^2 c_{k', \downarrow} c_{-k', \downarrow} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger} + u_{k'}^2 v_{k'}^2 c_{k', \uparrow} c_{-k', \uparrow} c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} + v_{k'}^4 c_{k', \downarrow} c_{-k', \downarrow} c_{k', \uparrow} c_{-k', \uparrow} c_{-k', \uparrow}^{\dagger} c_{k', \uparrow}^{\dagger} c_{-k', \downarrow}^{\dagger} c_{k', \downarrow}^{\dagger}). \quad (274)$$

Utilizando las propiedades de anticonmutación, esta última expresión puede simplificarse a

$$\langle 0|\hat{O} = \langle 0|\prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}}^{1BZ/2} (u_{\mathbf{k}'}^4 + 2u_{\mathbf{k}'}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 + v_{\mathbf{k}'}^4) \quad (275)$$

y utilizando  $(u_{\mathbf{k}'}^2 + v_{\mathbf{k}'}^2) = 1$  obtenemos la Ec. (271). Por lo tanto, la Ec. (269) se reduce a

$$\begin{aligned} & \langle \Psi|\hat{H}_0|\Psi \rangle \\ &= \langle 0|\sum_{\mathbf{k}, \sigma} (u_{\mathbf{k}}^2 + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \uparrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \downarrow} + v_{\mathbf{k}}^2 c_{\mathbf{k}, \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}) \times \\ & \quad \left[ \varepsilon_0(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} \right] (u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger + 2v_{\mathbf{k}}^2 c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger) |0 \rangle. \end{aligned} \quad (276)$$

Nuevamente utilizando las propiedades de anticonmutación la Ec. (276) se simplifica a

$$\begin{aligned} \langle \Psi|\hat{H}_0|\Psi \rangle &= 2 \langle 0|\sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_0(\mathbf{k}) (u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^2 u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^4) |0 \rangle \\ &= 2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_0(\mathbf{k}) (u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^4) = 2 \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_0(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k}}^2. \end{aligned} \quad (277)$$

Considerando únicamente la mitad de la primera zona de Brillouin, el resultado anterior se duplica y por lo tanto

$$\langle \Psi|\hat{H}_0|\Psi \rangle = 4 \sum_{\mathbf{k}}^{1BZ/2} \varepsilon_0(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k}}^2. \quad (278)$$

## D.2 Término $\langle \Psi | \hat{H}_{int} | \Psi \rangle$

El término  $\langle \Psi | \hat{H}_{int} | \Psi \rangle$  será desarrollado de manera similar al caso  $\langle \Psi | \hat{H}_0 | \Psi \rangle$ , por lo cual considerando las Ecs. (268) y (265), obtenemos

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{int} | \Psi \rangle &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \sigma'}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \sigma'} c_{\mathbf{k}', \sigma} \times \\
 &\prod_{\mathbf{k}''}^{1BZ/2} (u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''} c_{-\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger) (u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''} c_{-\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger) | 0 \rangle \\
 &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \sigma'}^\dagger \prod_{\mathbf{k}'' \neq \mathbf{k}'}^{1BZ/2} (u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''} c_{-\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger) (u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''} c_{-\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger) \times \\
 &(u_{\mathbf{k}'}^2 c_{-\mathbf{k}', \sigma'} c_{\mathbf{k}', \sigma} + u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} c_{-\mathbf{k}', \sigma'} c_{\mathbf{k}', \sigma} c_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger + u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} c_{-\mathbf{k}', \sigma'} c_{\mathbf{k}', \sigma} c_{-\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger + \\
 &v_{\mathbf{k}'}^2 c_{-\mathbf{k}', \sigma'} c_{\mathbf{k}', \sigma} c_{-\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger) | 0 \rangle. \quad (279)
 \end{aligned}$$

Usando las propiedades de anticonmutación, la ecuación anterior se transforma a

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{int} | \Psi \rangle &= \prod_{\mathbf{k}'' \neq \mathbf{k}'}^{1BZ/2} (u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''} c_{-\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger) (u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''} c_{-\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \sigma'}^\dagger \times \\
 &(-u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \delta_{\sigma', \downarrow} \delta_{\sigma, \downarrow} - u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} - v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger - \\
 &v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{-\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{-\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}', \uparrow}^\dagger) | 0 \rangle. \quad (280)
 \end{aligned}$$

Intercambiando los índices mudos de la sumatoria  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$ , se obtiene

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{int} | \Psi \rangle &= \prod_{\mathbf{k}'' \neq \mathbf{k}'}^{1BZ/2} (u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''} c_{-\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^\dagger) (u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''} c_{-\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'', \downarrow}^\dagger) \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}, \sigma, \sigma'} W_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} c_{\mathbf{k}', \sigma}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \times \\
 &(-u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \delta_{\sigma', \downarrow} \delta_{\sigma, \downarrow} - u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} - v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger - \\
 &v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger) | 0 \rangle. \quad (281)
 \end{aligned}$$

Completando el bra-ket se tiene que

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi | \hat{H}_{int} | \Psi \rangle \\
&= \langle 0 | \prod_{\mathbf{k}''' \neq \mathbf{k}'}^{1BZ/2} (u_{\mathbf{k}'''} + v_{\mathbf{k}'''} c_{\mathbf{k}''', \uparrow} c_{-\mathbf{k}''', \uparrow}) (u_{\mathbf{k}'''} + v_{\mathbf{k}'''} c_{\mathbf{k}''', \downarrow} c_{-\mathbf{k}''', \downarrow}) \times \\
& \quad \prod_{\mathbf{k}'' \neq \mathbf{k}'}^{1BZ/2} (u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''} c_{-\mathbf{k}'', \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'', \uparrow}^{\dagger}) (u_{\mathbf{k}''} + v_{\mathbf{k}''} c_{-\mathbf{k}'', \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'', \downarrow}^{\dagger}) \times \\
& \quad (u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \uparrow}) (u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}', \downarrow} c_{-\mathbf{k}', \downarrow}) \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}, \sigma, \sigma'} W_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} c_{\mathbf{k}', \sigma}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger} \times \\
& \quad (-u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \delta_{\sigma', \downarrow} \delta_{\sigma, \downarrow} - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} - v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} - \\
& \quad v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger}) | 0 \rangle. \quad (282)
\end{aligned}$$

Hacemos uso de la Ec. (271) para simplificar la ecuación anterior a

$$\begin{aligned}
& \langle \Psi | \hat{H}_{int} | \Psi \rangle \\
&= \langle 0 | \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}, \sigma, \sigma'} W_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}'}^2 c_{\mathbf{k}', \sigma}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \uparrow} c_{\mathbf{k}', \sigma}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger} + \\
& \quad u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}', \downarrow} c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \sigma}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}'}^2 c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \uparrow} c_{\mathbf{k}', \downarrow} c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \sigma}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger}) \times \\
& \quad (-u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \delta_{\sigma', \downarrow} \delta_{\sigma, \downarrow} - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} - v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} - \\
& \quad v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger}) | 0 \rangle \\
&= \langle 0 | \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}, \sigma, \sigma'} W_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} (-u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} - u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \delta_{\sigma', \downarrow} \delta_{\sigma, \downarrow} - v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \uparrow} - \\
& \quad v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \downarrow} - v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{-\mathbf{k}', \uparrow} c_{\mathbf{k}', \downarrow} - v_{\mathbf{k}'}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{\mathbf{k}', \downarrow} c_{-\mathbf{k}', \downarrow}) \times \\
& \quad (-u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \delta_{\sigma', \downarrow} \delta_{\sigma, \downarrow} - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} - v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} - \\
& \quad v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \uparrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \uparrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}}^2 \delta_{\sigma, \downarrow} \delta_{\sigma', \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger}) | 0 \rangle. \quad (283)
\end{aligned}$$

Simplificando la Ec (283) se obtiene

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \hat{H}_{int} | \Psi \rangle &= \langle 0 | \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} W_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} (2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} + \\
& \quad v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 c_{\mathbf{k}', \downarrow} c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \uparrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} + \\
& \quad v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 c_{-\mathbf{k}', \uparrow} c_{\mathbf{k}', \downarrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 c_{\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}', \uparrow} c_{-\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger}) | 0 \rangle. \quad (284)
\end{aligned}$$

Utilizando nuevamente las propiedades de anticonmutación, obtenemos que

$$\langle \Psi | \hat{H}_{int} | \Psi \rangle = \langle 0 | \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} W_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} (2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2) | 0 \rangle, \quad (285)$$

lo cual conduce a

$$\langle \Psi | \hat{H}_{int} | \Psi \rangle = \langle 0 | \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} 2W_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} | 0 \rangle \quad (286)$$

y considerando solamente la mitad de la primera zona de Brillouin, obtenemos

$$\langle \Psi | \hat{H}_{int} | \Psi \rangle = 8 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{1BZ/2} W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}. \quad (287)$$

Finalmente, de las propiedades de paridad dadas por  $u_{\mathbf{k}'} = u_{-\mathbf{k}'}$  y  $v_{\mathbf{k}'} = -v_{-\mathbf{k}'}$ , únicamente sobrevive la parte impar de  $W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$  que puede escribirse como  $(W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'})/2$ , es decir,

$$\langle \Psi | \hat{H}_{int} | \Psi \rangle = 4 \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{1BZ/2} (W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} - W_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'}) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}. \quad (288)$$

## Referencias

- [Abrikosov, 1960] A.A. Abrikosov, *Soviet Physics – JETP* **5**, 1174 (1957).
- [Anderson, 1997] P.W. Anderson, *The Theory of Superconductivity in the High  $T_c$  Cuprates*, Princenton University Press, Princeton N.Y. (1997).
- [Ashcroft, et al., 1976] N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Thomson Learning Inc. (1976) p 45.
- [Balian, et al., 1963] R. Balian y N.R. Werthamer, *Phys. Rev.* **131**, 1553 (1963).
- [Bardeen, et al., 1957] J. Bardeen, L.N. Cooper y J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [Beenen, et al., 1995] J. Beenen y D.M. Edwards, *Phys. Rev.B* **52**, 13636 (1995).
- [Bogoliubov, 1958] N.N. Bogoliubov, *Nuovo Cimento* **7**, 794 (1958).
- [Cooper, 1956] L.N. Cooper, *Phys. Rev.*, **104**, 1189 (1956).
- [Dagotto, et al., 1994] E. Dagotto, J. Riera, Y.C. Chen, A. Moreo, A. Nazarenko, F. Alcaraz y F. Ortolani, *Phys. Rev. B*, **49**, 3548 (1994).
- [Entel, et al., 1990] P. Entel y J. Zielinsky, *Phys. Rev. B*, **42**, 307 (1990).
- [Hirsch, et al., 1989] J.E. Hirsch y F. Marsiglio, *Phys. Rev. B* **39**, 11515 (1989).
- [Hubbard, 1963] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. London A* **276**, 238 (1963).
- [Ishida, et al., 1998] K. Ishida, H. Mukuda, Y. Kitaoka, K. Asamaya, Z.Q. Mao, Y. Mori y Y. Maeno, *Nature* **396**, 658 (1998).
- [Kaplan, et al., 2005] I.G. Kaplan, O. Navarro y J.A. Sánchez, *Physica C* **419**, 13 (2005).



- [Leggett, et al., 1975] A.J. Leggett, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 331 (1975).
- [Mackenzie, et al., 1996] A.P. Mackenzie, N.E. Hussey, A.J. Diver, S.R. Julian, Y. Maeno, S. Nishizaki, y T. Fujita, *Phys. Rev. B* **54**, 7425 (1996).
- [Mackenzie, et al., 2003] A.P. Mackenzie y Y. Maeno, *Rev. of Modern Phys.* **75**, 657 (2003).
- [Maeno, et al., 1994] Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, J.G. Bednorz y F. Lichtenberg, *Nature* **372**, 532 (1994).
- [Maeno, et al., 2001] Y. Maeno. T.M. Rice y M. Sigrist, *Physics Today* **54**, 42 (2001).
- [Mahan, 1990].G.D. Mahan, *Many Particle Physics*, Plenum Press (1990).
- [Marsiglio, et al., 1990] F. Marsiglio y J.E. Hirsch, *Physica C* **171**, 554 (1990).
- [Matzdorf, et al., 2000] R. Matzdorf, Z. Fang, Ismail, J. Zhang, T. Kimura, Y. Tokura, K. Terakura y E.W. Plummer, *Science* **289**, 746 (2000).
- [Marder, 2000]M.P. Marder, *Condensed Matter Physics*, Wiley, New York, (2000) p. 815.
- [Mazin, et al., 1997] I.I. Mazin y D.J. Singh, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 733 (1997).
- [Micnas, et al.,1990] R. Micnas, J. Ranninger, y S. Robaszkiewicz, *Rev. Mod. Phys.*, **62**, 113 (1990).
- [Millán, et al., 2004] J. S. Millán, L.A. Pérez y C. Wang, *Physica C* **408**, 259 (2004).
- [Millán, et al., 2005a] J. S. Millán, L.A. Pérez y C. Wang, *Physics Letters A* **335**, 505 (2005).

- [Millán, et al., 2005b] J. S. Millán, L.A. Pérez y C. Wang, (aceptado para su publicación en *J. Phys. Chem. Solids*, 2005).
- [Mineev, et al., 1999] V.P. Mineev y K.V. Samokhin, *Introduction to Unconventional Superconductivity*, Gordon and Breach Science Publishers (1999).
- [Monthoux, et al., 1994] P. Monthoux y D.J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1874 (1994).
- [Moriya, et al., 1994] T. Moriya y K. Ueda, *J. Phys. Soc. Japan* **63**, 1871 (1994).
- [Navarro, et al., 1992] O. Navarro y C. Wang, *Solid State Commun.* **83**, 473 (1992).
- [Navarro, et al., 1993] O. Navarro y C. Wang, *Surface Science* **287**, 622 (1993).
- [Nomura, et al., 2000] T. Nomura y K. Yamada, *J. Phys. Soc. Japan* **69**, 3678 (2000).
- [Nomura, et al., 2002] T. Nomura y K. Yamada, *J. Phys. Soc. Japan* **71**, 1973 (2002).
- [Ogucchi, 1995] T. Ogucchi, *Phys. Rev. B* **51**, 1385 (1995).
- [Pérez, et al., 2001] L.A. Pérez y C. Wang, *Solid State Commun.* **118**, 589 (2001).
- [Pérez, et al., 2002] L.A. Pérez y C. Wang, *Solid State Commun.* **121**, 669 (2002).
- [Pérez, 2002] L.A. Pérez, Tesis: *Superconductividad con simetría d en el modelo de Hubbard*, UNAM (2002).
- [Pérez, et al., 2003] L.A. Pérez y C. Wang, *J. Low Temp. Phys.* **131**, 423 (2003).

- [Pérez, *et al.*, 2005] L.A. Pérez, J.S. Millán y C. Wang, (aceptado para su publicación en *Physica B*, 2005).
- [Rickayzen, 1966] G. Rickayzen, *Theory of Superconductivity*, John Wiley (1966).
- [Scalapino, *et al.*, 1987] D.J. Scalapino, E. Loh (Jr) y J.E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **35**, 6694 (1987).
- [Schafroth, 1955] M. Schafroth, *Phys. Rev.* **100**, 463 (1955).
- [Singh, 1995] D.J. Singh, *Phys. Rev. B* **52**, 1358 (1995).
- [Thinkam, 1996] M. Thinkam, *Introduction to Superconductivity*, Mc-Graw Hill (1996).
- [Tsuei, *et al.*, 2000] C.C. Tsuei y J.R. Kirtley, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 969 (2000).
- [Tsuneto, 1998] T. Tsuneto, *Superconductivity and Superfluidity*, Cambridge University Press, (1998)
- [Valantin, 1958] J.G. Valantin, *Nuovo Cimento* **7**, 843 (1958).
- [Wollman, *et al.*, 1993] D.A. Wollman, D.J. Van Harlingen, W.C. Lee, D.M. Ginsberg y A.J. Leggett, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2134 (1993).
- [Yaguchi, *et al.*, 2003] H. Yaguchi, M. Wada, T. Akima, Y. Maeno y T. Ishiguro, *Phys. Rev. B* **67**, 214519 (2003).
- [Yogi, *et al.*, 2004] M. Yogi, Y. Kitaoka, S. Hashimoto, T. Yasuda, R. Settai, T. D. Matsuda, Y. Haga, Y. Ônuki, P. Rogl y E. Bauer, *Phys. Rev. Lett.* **93** (2), 27003 (2004).