



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

SUPERCONDUCTIVIDAD EN REDES
TRIANGULARES ANISOTRÓPICAS

TESIS

que para obtener el título de:

FÍSICO

presenta:

Heinrich Fidencio Terborg del Rosal

Director de tesis: Dr. Luis Antonio Pérez López



Abril de 2007



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central

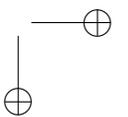
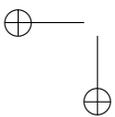
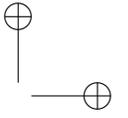
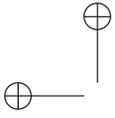


UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

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.





UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

SUPERCONDUCTIVIDAD EN REDES
TRIANGULARES ANISOTRÓPICAS

TESIS

que para obtener el título de:

FÍSICO

presenta:

Heinrich Fidencio Terborg del Rosal

Director de tesis: Dr. Luis Antonio Pérez López



Abril de 2007

II

Hoja de Datos del Jurado

1. Datos del alumno
Apellido paterno: Terborg
Apellido materno: del Rosal
Nombre(s): Heinrich Fidencio
Teléfono: 56 33 02 97
Universidad: Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad: Facultad de Ciencias
Carrera: Física
Número de cuenta: 97001458
2. Datos del tutor
Grado: Dr
Nombre(s): Luis Antonio
Apellido paterno: Pérez
Apellido materno: López
3. Datos del sinodal 1
Grado: Dr
Nombre(s): Luis Fernando
Apellido paterno: Magaña
Apellido materno: Solís
4. Datos del sinodal 2
Grado: Dr
Nombre(s): Luis Antonio
Apellido paterno: Pérez
Apellido materno: López
5. Datos del sinodal 3
Grado: Dra
Nombre(s): Vicenta
Apellido paterno: Sánchez
Apellido materno: Morales
6. Datos del sinodal 4
Grado: Dr
Nombre(s): Raúl Patricio
Apellido paterno: Esquivel
Apellido materno: Sirvent
7. Datos del sinodal 5
Grado: Dra
Nombre(s): Rosario
Apellido paterno: Paredes
Apellido materno: Gutiérrez

FACULTAD DE CIENCIAS

División de Estudios Profesionales



ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ
Jefe de la División de Estudios Profesionales
Facultad de Ciencias
P r e s e n t e .

Por este medio hacemos de su conocimiento que hemos revisado el trabajo escrito titulado:

"Superconductividad en redes triangulares anisotrópicas"

realizado por **Terborg del Rosal Heinrich Fidencio**, con número de cuenta **09700145-8**, quien opta por titularse en la opción **Tesis** en la licenciatura en **Física**. Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Propietario	Dr.	Luis Fernando Magaña Solís	
Propietario Tutor(a)	Dr.	Luis Antonio Pérez López	
Propietario	Dra.	Vicenta Sánchez Morales	
Suplente	Dr.	Raúl Patricio Esquivel Sirvent	
Suplente	Dra.	Rosario Paredes Gutiérrez	

Atentamente
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Ciudad Universitaria, D.F., a 20 de marzo del 2007.
**LA COORDINADORA DEL COMITÉ DE TITULACION
DE LA LICENCIATURA EN FÍSICA**

M. EN C. ALICIA ZARZOSA PÉREZ
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Señor sinodal: antes de firmar este documento, solicite al estudiante que le muestre la versión digital de su trabajo y verifique que la misma incluya todas las observaciones y correcciones que usted hizo sobre el mismo.

IV

A mis padres

Agradecimientos

Agradezco a mi tutor, el Dr. Luis Antonio Pérez López, por su gran paciencia, por el apoyo y las innumerables horas de su tiempo que me ha brindado para hacer posible este trabajo.

A los profesores que integran el jurado: Dr. Luis Fernando Magaña Solís, Dra. Vicenta Sánchez Morales, Dr. Raúl Patricio Esquivel Sirvent y Dra. Rosario Paredes Gutiérrez por sus comentarios y sugerencias, que además de ayudar a mejorar el trabajo, contribuyeron a mi formación profesional. Agradezco también a la Dirección General de Asuntos del Personal Académico por la beca de tesis de licenciatura otorgada a través del proyecto PAPIIT IN116605.

Asimismo, agradezco al Instituto de Física de la UNAM que, como estudiante asociado, me permitió disponer de sus servicios e instalaciones durante la elaboración de esta tesis.

Al Departamento de Supercómputo de la Dirección General de Servicios de Cómputo Académico (DGSCA-UNAM) por permitir el uso de la computadora Bakliz donde fueron realizados parte de los cálculos presentados en esta tesis.

A Roly por toda la ayuda prestada, a Moi por todo lo que me enseñó de computación, a Gerardo por las sugerencias que contribuyeron al trabajo escrito, a Elba por su paciencia y comprensión.

A mis amigos: Alejandro, José, Ata, Fernando, Eduardo, Oliver, Yolitzi, Miriam, Carlos, Otto, Roberto, Yaxk'In, Leonid, Yannick y Anaid por su apoyo y amistad.

Finalmente, quiero agradecer a toda mi familia por su apoyo y especialmente por la motivación que me brindan.

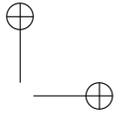
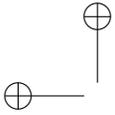
Índice general

1. Introducción	1
1.1. Superconductividad	1
1.2. Superconductores Orgánicos	4
2. Modelo de amarre fuerte	9
2.1. Hamiltoniano de Amarre Fuerte	9
2.2. Densidad de estados en redes triangulares	13
3. Teoría Microscópica de la Superconductividad	19
3.1. Pares de Cooper	20
3.2. Formalismo de segunda cuantización	23
3.3. Formalismo a $T = 0$	24
3.4. Formalismo a $T \neq 0$	30
3.5. Resultados de BCS	35
4. Modelo de Hubbard	37
4.1. Hamiltoniano de Hubbard atractivo	37
4.2. Soluciones Analíticas	40
5. Estado base superconductor en redes triangulares anisotrópicas	43
5.1. Brecha superconductora a $T=0$ y Temperatura crítica	44
5.2. Brecha superconductora a $T \neq 0$ y Capacidad calorífica electrónica	56
6. Conclusiones	65
Bibliografía	67

Resumen

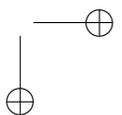
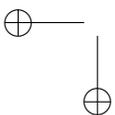
Durante los últimos veinte años la investigación en conductores orgánicos se ha convertido en una de las ramas más activas de la física de la materia condensada. La principal diferencia entre los conductores orgánicos y los metales convencionales es que los primeros están formados de bloques construidos a partir de átomos de carbono y sus combinaciones con otros elementos tales como azufre, selenio u oxígeno. Como resultado de esto, al formarse el cristal, estas unidades moleculares preservan en gran medida sus características específicas tales como orbitales moleculares, energía de ionización y modos vibracionales intramoleculares. La geometría de los bloques estructurales y la manera en que se empaquetan en el cristal determinan la dimensionalidad efectiva de la estructura electrónica del compuesto dando lugar, en muchos casos, a una estructura electrónica cuasibidimensional. En particular, la estructura electrónica alrededor del nivel de Fermi de los compuestos orgánicos del tipo $\kappa - (BEDT - TTF)_2X$ puede representarse por el hamiltoniano de amarre fuerte de una red triangular anisotrópica con integrales de transferencia t entre orbitales de primeros vecinos y t' entre orbitales de segundos vecinos. El confinamiento de los portadores en dos dimensiones junto con la pequeña longitud de coherencia de los pares de Cooper en estos materiales sugiere el uso de un modelo basado en interacciones electrónicas locales para describir el estado superconductor. Una manera general de analizar la correlación electrónica es el modelo de Hubbard, que es quizás el modelo más simple que considera interacciones *electrón-electrón* de corto alcance.

El objetivo de la presente tesis consistió en llevar a cabo un estudio sistemático de la superconductividad en redes triangulares anisotrópicas por medio del modelo de Hubbard. En particular estudiamos la temperatura crítica, la brecha superconductora y el calor específico, como función de los parámetros del modelo como lo son las integrales de transferencia, la densidad de portadores del material y la energía de interacción intra-atómica.



VIII

Se encontraron las configuraciones de parámetros que favorecen la superconductividad, hallándose que a energías de interacción débiles, los máximos de temperatura crítica se encuentran en redes con mayor frustración geométrica mientras que a interacciones más fuertes la temperatura crítica máxima se encuentra cuando la red se vuelve cuadrada. Se encontró además que, para una topología de red dada, la temperatura crítica máxima se encuentra para aquella concentración de portadores cuyo nivel de Fermi está cerca de una singularidad de van Hove. Por otra parte, se encontró que tanto la discontinuidad en el calor específico como el cociente de la brecha dependen de la concentración de electrones. Más aún, la máxima discontinuidad en el calor específico se obtiene para redes con mínima frustración. Finalmente, se encontraron algunas simetrías en el modelo de Hubbard para el caso particular de redes triangulares anisotrópicas que relacionan diferentes configuraciones de parámetros con un mismo valor de la temperatura crítica y la brecha superconductora.



Capítulo 1

Introducción

1.1. Superconductividad

La superconductividad fue descubierta por H. Kamerlingh Onnes en 1911 justo tres años después de haber conseguido licuar el helio. Lo que encontró fue que la resistencia eléctrica de algunos metales desaparecía por completo dentro de un estrecho rango alrededor de una temperatura crítica T_c [SCHRIEFFER and TINKHAM, 1999]. Dicha temperatura crítica era del orden de unos cuantos Kelvin y dependía del metal en cuestión. Dos décadas más tarde, Meissner y Ochsenfeld (1933) descubrieron que los superconductores, además de conductores perfectos, eran diamagnetos perfectos. Este fenómeno se conoce actualmente como efecto Meissner. Antes de este descubrimiento, se pensaba que los superconductores simplemente eran materiales que presentaban resistencia cero al paso de la corriente, pero el efecto Meissner dio pie a definir un superconductor como un material que presenta tanto resistencia nula como efecto Meissner. Uno de los primeros modelos en atacar el problema de la superconductividad fue el modelo fenomenológico de F. y H. London (1935) que describía las propiedades de resistencia cero y efecto Meissner. En 1950 Ginzburg y Landau extendieron la teoría fenomenológica de London, basándose en la teoría de transiciones de fase de segundo orden de Landau. Introdujeron una función de onda de '*electrones superconductores*'. Esta teoría describe la interfase entre las fases normal y superconductor en presencia de campo magnético crítico H_c . Sin embargo no fue hasta 1957 con la llegada de la teoría BCS (Bardeen, Cooper y Schrieffer) que existió una descripción microscópica del mecanismo de la superconductividad, atribuyéndose a la formación de pares de electrones

mejor conocidos como pares de Cooper. A partir de la teoría BCS Gor'kov en 1959 recuperó la teoría de Ginzburg y Landau como un caso límite de la teoría BCS [SCHRIEFFER and TINKHAM, 1999].

Durante las casi tres décadas siguientes se siguieron encontrando nuevos materiales que presentaban superconductividad al ser enfriados con helio líquido, pero en 1986 se descubrieron compuestos del tipo La-Ba-Cu-O con temperaturas críticas mucho mayores que aquellas de los superconductores conocidos hasta entonces, y que permitían el uso de nitrógeno líquido como refrigerante.

Generalmente se hace la siguiente distinción entre superconductores dependiendo de su comportamiento bajo campos magnéticos [GINZBURG and ANDRYUSHIN, 2004].

Superconductores tipo I. Es una categoría conformada principalmente por metales. Presentan temperaturas críticas bastante bajas y se considera que la interacción atractiva entre los electrones de estos materiales para formar pares de Cooper se da por interacción *electrón-fonón* debido a las deformaciones de la red al paso de los electrones. Fueron el primer tipo de superconductores que se descubrió y su funcionamiento a nivel microscópico es explicado por la teoría BCS

Superconductores del tipo II. Comprende principalmente compuestos metálicos y aleaciones, aunque también hay algunas excepciones como el vanadio, tecnecio y niobio [GINZBURG and ANDRYUSHIN, 2004], en esta categoría también están comprendidas las cerámicas de óxidos metálicos. Usualmente los superconductores del tipo II alcanzan temperaturas críticas mucho más altas que los del tipo I, sin embargo el mecanismo que produce la superconductividad aún no se ha comprendido en su totalidad.

Los superconductores del tipo II se caracterizan por tener dos valores del campo magnético crítico (H_{c1}, H_{c2}) y por tanto soportan campos magnéticos mayores, preservando superconductividad, que los superconductores del tipo I (donde la superconductividad desaparece al alcanzar el campo crítico H_{c1}). Esta resistencia mayor la consiguen permitiendo cierta penetración del campo magnético una vez que se ha alcanzado el valor crítico H_{c1} presentando superconductividad a lo largo de franjas en el material. Una vez alcanzado el valor crítico H_{c2} la superconductividad desaparece.

La simetría de la función de onda de los pares de Cooper, permite además hacer la distinción entre superconductores convencionales (pares con simetría s) y no-convencionales (simetrías p y d) en el primer caso podemos mencionar a los metales cuyas temperaturas críticas generalmente son menores a $10 K$ [KITTEL, 2005] y ciertas aleaciones metálicas con temperaturas críticas que pueden alcanzar los $23 K$ [MATTHIAS *et al.*, 1954].

1.1 Superconductividad

3

Dentro de los superconductores no-convencionales podemos mencionar a los superconductores cerámicos de alta T_c cuyos pares tienen simetría d como es el caso de $Tl_2Ba_2CuO_{6+x}$ [TSUEI *et al.*, 1997] y $YBa_2Cu_2O_{7-x}$ [WOLLMAN *et al.*, 1993][TSUEI *et al.*, 1994], así como el rutenato de estroncio cuyos pares tienen simetría p [ISHIDA, 1998]. Más aún existe evidencia experimental de un apareamiento anisotrópico en la familia de superconductores orgánicos del tipo $\kappa - (BEDT - TTF)_2X$ [MCKENZIE, 1997] [JEROME and SCHULZ, 2002][SINGLETON and MIELKE, 2002], los cuales presentan temperaturas críticas bajas que van desde $0.4 K$ hasta $12 K$ a presión atmosférica [SUPERCONDUCTORS.ORG, 2007]. Sin embargo, propiedades como su alta resistencia a campos magnéticos y la presencia de efecto Hall cuántico los han convertido en objeto actual de estudio.

Entre las principales características de los superconductores no-convencionales podemos mencionar la pequeña longitud de coherencia (tamaño de los pares de Cooper) y que el transporte electrónico se presenta en estructuras de baja dimensionalidad [YANASEA *et al.*, 2003]. De manera general, para formar pares se requiere la existencia de una fuerza atractiva entre electrones que pueda sobreponerse a la repulsión coulombiana entre ellos. Para los superconductores convencionales se considera que dicha interacción atractiva es de origen fonónico, sin embargo este modelo ya no es válido para la superconductividad de alta T_c puesto que la interacción fonónica da lugar a pares con longitud de coherencia muy grande y temperaturas críticas relativamente pequeñas. Se han propuesto varios mecanismos para describir el origen del apareamiento electrónico de corto alcance, mejor conocido como apareamiento local [MICNAS *et al.*, 1990]. Entre estos podemos mencionar:

- Acoplamiento electrón-red que da origen a polarones, donde dos polarones sienten una interacción atractiva debido a la deformación de la red [ALEXANDROV and RANNINGER, 1981] [MICNAS *et al.*, 1987].
- Acoplamiento debido a excitones o plasmones [GINZBURG, 1965] [HIRSCH and SCALAPINO, 1985].
- Mecanismos electrónicos capaces de producir una atracción no retardada debido a la polarizabilidad de los aniones, consiguiendo un apantallamiento de la fuerza repulsiva de origen coulombiano [IONOVA *et al.*, 1977] [IONOV *et al.*, 1985].
- Enlaces anormales de sistemas conocidos como metales no-simples [TING *et al.*, 1980].

1.2. Superconductores Orgánicos

La mayoría de los materiales compuestos por moléculas orgánicas no son metales puesto que sus bandas de valencia se encuentran usualmente llenas. Al combinar moléculas orgánicas con aniones no orgánicos, que sirven como receptores o donadores, aparecen bandas parcialmente llenas. Los conductores orgánicos son materiales compuestos por moléculas orgánicas relativamente pequeñas formadas por átomos de carbono combinados con elementos tales como azufre, selenio, hidrógeno u oxígeno [SINGLETON and MIELKE, 2002]. Como resultado de esto, al formarse el cristal, estas unidades moleculares preservan en gran medida sus características específicas tales como orbitales moleculares, energías de ionización y modos vibracionales intramoleculares. La geometría de los bloques estructurales y la manera en que se empaquetan en el cristal determinan la dimensionalidad efectiva de la estructura electrónica del compuesto dando lugar, en muchos casos, a una estructura electrónica cuasi-bidimensional. A partir de 1981 se han sintetizado más de 400 conductores orgánicos, donde más de 50 de ellos son superconductores [SUPERCONDUCTORS.ORG, 2007]. En estos materiales se han observado, además de la superconductividad, numerosos fenómenos como por ejemplo ondas de densidad de carga, ondas de densidad de espín y efecto Hall cuántico [SINGLETON and MIELKE, 2002].

En muchos de los superconductores orgánicos el bloque estructural es una molécula conocida como $BEDT-TTF$ donde $BEDT$ =bis(etilenoditio), TTF = tetratiafulvaleno (ver figura 1.1). Esta molécula es aproximadamente plana por lo que puede empaquetarse de varias formas para construir un sólido. Para crear bandas electrónicas es necesario apilar estas moléculas una tras otra para que los orbitales moleculares puedan traslaparse permitiendo la transferencia de electrones entre moléculas. Esto puede conseguirse agregando un segundo tipo de molécula no-orgánica (o colección de moléculas) que etiquetamos con X a un número j de moléculas $BEDT-TTF$ para formar un compuesto $(BEDT-TTF)_jX$. Las j moléculas $BEDT-TTF$ se encargan de donar un electrón a X dándole una carga negativa razón por lo que se conoce como anión. La transferencia de carga sirve para enlazar al compuesto así formado y dejando un hueco compartido por las j moléculas. Esto significa que las bandas formadas por el traslape de los orbitales moleculares de $(BEDT-TTF)$ estarán parcialmente llenas esperándose que sean conductoras. La figura 1.2 muestra el arreglo molecular en el compuesto superconductor $\kappa-(BEDT-TTF)_2Cu(NCS)_2$ con una $T_c \approx 10.4K$ [URAYAMA *et al.*, 1988]. Aquí κ denota el tipo empaquetamiento de las moléculas $BEDT-TTF$. Cabe señalar que diferentes tipos

1.2 Superconductores Orgánicos

5

de empaquetamiento pueden lograrse con un tipo particular de anión. Las moléculas *BEDT-TTF* están empaquetadas en capas separadas por capas de $Cu(NCS)_2$, dentro de las capas *BEDT-TTF* la integral de transferencia (ver (2.7)) que parametriza el salto de electrones entre dichas moléculas será relativamente grande. Por el contrario, en la dirección perpendicular a dichas capas, las moléculas *BEDT-TTF* están muy separadas entre sí, por lo que las integrales de transferencia serán mucho menores en esta dirección resultando en un compuesto cuasi-bidimensional en lo que respecta a las propiedades electrónicas.

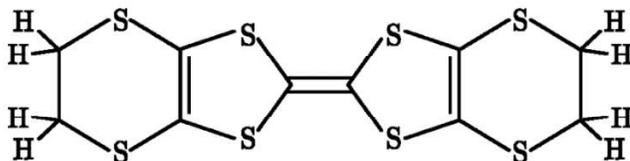


Figura 1.1: Molécula de *bis(etilenoditio)tetratiafulvaleno* (*BEDT-TTF*), tiene una estructura molecular aproximadamente plana que le permite empaquetarse de diversas maneras para construir un sólido.[SINGLETON and MIELKE, 2002].

En el caso particular de $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu_2(CN)_3$ se sugiere que la estructura de bandas puede aproximarse por un modelo de amarre fuerte para una red triangular anisotrópica con parámetros de salto t y t' como se muestra en la figura 2.1 [KONDO and MORIYA, 2004].

Las estructuras cristalinas del tipo $\kappa - (ET)_2X$ donde ET corresponde a BEDT-TTF, son cuasi bidimensionales. Experimentalmente se observa que es un aislante de Mott a presión ambiente [SHIMIZU *et al.*, 2003] y bajo presión moderada sufren un cambio de fase a estado superconductor con $T_c = 3.9K$ [KOMATSU *et al.*, 1996]. Por aislante de Mott nos referimos a un material el cual se esperaría que fuera conductor de acuerdo a su estructura

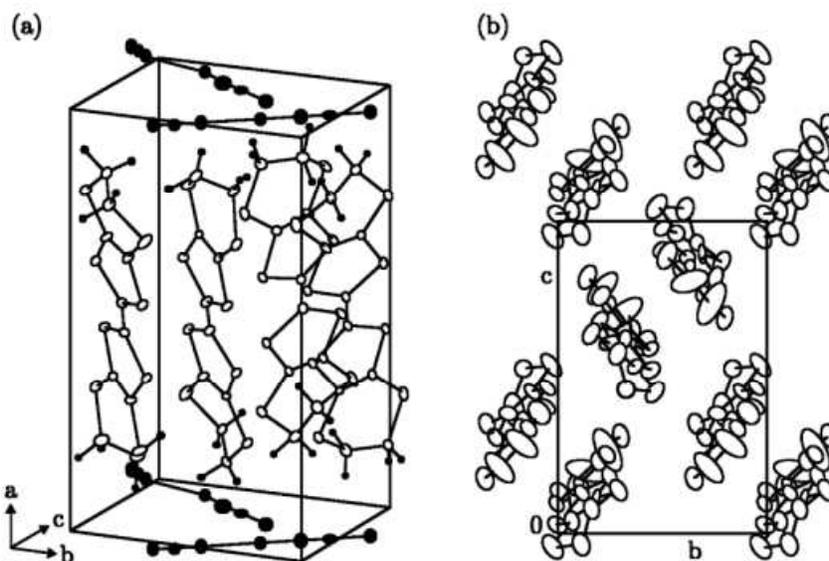
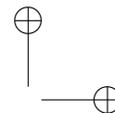
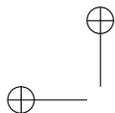


Figura 1.2: Estructura de la sal orgánica $\kappa - (BEDT - TTF)_2Cu(NCS)_2$ ($T_c \approx 10.4K$). (a) Vista lateral del arreglo molecular. Las moléculas $BEDT - TTF$ se empaquetan en planos separados por capas de los aniones $Cu(NCS)_2$. (b) Vista inferior de los planos $BEDT - TTF$ mostrando el alto grado de empaquetamiento que permite el traslape de los orbitales moleculares. El tamaño de la celda unitaria es 16.248\AA , 8.44\AA y 13.124\AA a temperatura ambiente [URAYAMA *et al.*, 1988].



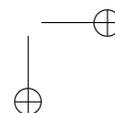
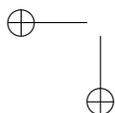
1.2 Superconductores Orgánicos

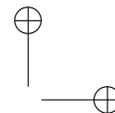
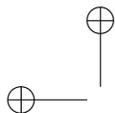
7

de bandas, es decir, no tiene completamente llena su banda de conducción. Sin embargo resultan ser aislantes. Este efecto se debe a interacciones electrón-electrón que no son tomadas en cuenta por la teoría convencional de bandas. El estado superconductor de éstos materiales ocurre en el estado metálico de la transición de Mott donde no existe un momento magnético local o bien, no se puede definir [KONDO and MORIYA, 2004].

Aunque todavía no hay un modelo que describa el fenómeno de la superconductividad en estos materiales, modelos simples como el Hubbard han logrado buena correlación con resultados experimentales [PÉREZ *et al.*, 2007]. Se ha estado abordando el problema de la superconductividad en esta clase de sustancias utilizando el modelo de Hubbard para una red cuadrada con integrales de transferencia t y t' (ver (2.8)) entre orbitales de primeros y segundos vecinos respectivamente [MACKENZIE, 1998].

Para el caso de $t'/t = 1$ el modelo es topológicamente equivalente a una red triangular equilátera. Es conocido que las redes triangulares equiláteras presentan frustración geométrica para un sistema antiferromagnético de espines.





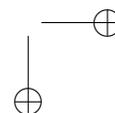
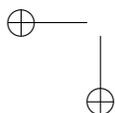
Capítulo 2

Modelo de amarre fuerte

2.1. Hamiltoniano de Amarre Fuerte

El problema de encontrar una función que describa el potencial de un electrón en un cristal real es bastante complicado puesto que hay que tomar en cuenta tanto el efecto de los iones como el de los demás electrones en el cristal, es por esto que se hacen aproximaciones como el modelo de amarre fuerte. Consideremos un sistema con dos átomos idénticos libres, al ir acercando un átomo al otro, las funciones de onda de sus electrones comenzarán a traslaparse. Por cada nivel de energía que tenían los electrones en los átomos libres, se formarán dos nuevos niveles, uno con energía mayor y otro con energía menor a la del nivel original. Si en vez de un sistema con dos átomos, tenemos un sistema con N átomos, cada orbital de un átomo libre se desdoblará en N orbitales al juntar todos los átomos para formar un cristal. De hecho, la interacción coulombiana es la responsable de desdoblar los niveles de energía en un átomo libre para formar bandas en un cristal. El ancho de la banda será proporcional al traslape entre sitios vecinos [KITTEL, 2005] y habrá bandas formadas por cada uno de los estados s, p, d, f, \dots de los átomos libres. Las bandas también pueden llegar a traslaparse entre sí al coincidir su valor de energía para ciertos valores de \mathbf{k} dentro de la primera zona de Brillouin. Antes de comenzar a explicar el modelo de amarre fuerte, es necesario introducir conceptos básicos como las funciones de Bloch y Wannier.

F. Bloch demostró el teorema que lleva su nombre, en cual se prueba que las soluciones de la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico



deben ser de la forma

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = u(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.1)$$

donde $u(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ tiene la periodicidad de la red, es decir $u(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = u(\mathbf{k}, \mathbf{r} + \mathbf{R}_l)$ con \mathbf{R}_l un vector de traslación de la red. Si \mathbf{G}_m es un vector de la red recíproca, se puede probar que

$$\psi(\mathbf{k} + \mathbf{G}_m, \mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l) \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (2.2)$$

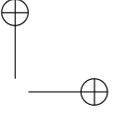
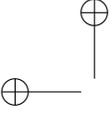
A las $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ se les conoce como funciones de Bloch, y como puede observarse de la ecuación 2.1, si hacemos $u(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ constante $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ representará una onda plana que describe a un electrón con vector de onda \mathbf{k} . Si hacemos la distancia entre los átomos que forman el cristal muy grande, el espacio recíproco tenderá a colapsarse haciendo $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ por lo que $\psi(\mathbf{0}, \mathbf{r}) = u(\mathbf{0}, \mathbf{r})$ debería describir alguno de los orbitales atómicos de un átomo libre. Puesto que los orbitales atómicos hacen distinción entre estados $1s, 2s, 1p, \dots$ debemos hacer la misma distinción en las funciones de Bloch para que cuando la distancia interatómica se haga tender a infinito, las funciones de Bloch tiendan a alguno de los orbitales atómicos. Denotaremos entonces $\psi_m(\mathbf{0}, \mathbf{r})$ a la función de Bloch que en el límite de átomos aislados colapsa en el m -ésimo orbital atómico. De la ecuación (2.2) se puede observar que las funciones de Bloch son periódicas en el espacio recíproco lo cual hace posible su representación en series de Fourier como sigue

$$\psi_m(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = N^{-\frac{1}{2}} \sum_n \varphi_m(\mathbf{R}_n, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n} \quad (2.3)$$

en donde N es el número de átomos en el cristal y a las funciones $\varphi_m(\mathbf{R}_n, \mathbf{r})$ se les conoce como funciones de Wannier. Estas funciones las podemos obtener como

$$\varphi_m(\mathbf{R}_n, \mathbf{r}) = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{k}} u_m(\mathbf{k}, \mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)} \quad (2.4)$$

donde la suma es sobre la primera zona de Brillouin. Como las $u_m(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ tienen la periodicidad de la red, las funciones de Wannier dependerán sólo de la diferencia $\mathbf{r} - \mathbf{R}_n$; esto es, están centradas en el sitio \mathbf{R}_n de la red. Las funciones de Wannier son ortogonales entre sí para diferentes bandas y sitios distintos, por lo que forman un conjunto completo y constituyen una base alternativa para la descripción exacta de las soluciones del hamiltoniano del cristal.



2.1 Hamiltoniano de Amarre Fuerte

11

De la ecuación de Schrödinger $H|m, \mathbf{k}\rangle = \varepsilon_m(\mathbf{k})|m, \mathbf{k}\rangle$ donde $|m, \mathbf{k}\rangle$ es el ket correspondiente a $\psi_{m, \mathbf{k}}$ obtenemos que la energía $\varepsilon_m(\mathbf{k})$ puede escribirse como

$$\varepsilon_m(\mathbf{k}) = \langle m, \mathbf{k} | H | m, \mathbf{k} \rangle = N^{-1} \sum_j \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle m, j | H | m, i \rangle \quad (2.5)$$

donde $|m, i\rangle$ es el ket que representa $\varphi_{m, i} \equiv \varphi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$. Por simplicidad en la notación, nos restringiremos al caso de una sola banda por lo que ya no será necesario el subíndice m .

Haciendo las siguientes definiciones:

$$\alpha \equiv N^{-1} \langle \varphi_j | H | \varphi_j \rangle = \int \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) H \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}, \quad (2.6)$$

y cuando $i \neq j$

$$t_{ij} \equiv N^{-1} \langle \varphi_j | H | \varphi_i \rangle = \int \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) H \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r}. \quad (2.7)$$

El modelo de amarre fuerte consiste en considerar únicamente los valores de t_{ij} que corresponden a vecinos cercanos, haciendo cero el resto. Es decir, en el caso de un modelo de amarre fuerte a segundos vecinos se hace la siguiente aproximación sobre t_{ij}

$$t_{ij} = \begin{cases} t & \text{si } i \text{ es primer vecino de } j \\ t' & \text{si } i \text{ es segundo vecino de } j \\ 0 & \text{cualquier otro caso} \end{cases} \quad (2.8)$$

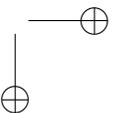
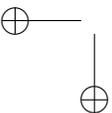
por lo que la ecuación (2.5) queda como

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \alpha + \sum_i' e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} t_{ij}, \quad (2.9)$$

donde la suma primada indica que la suma se hace sobre los vecinos del sitio j y se ha definido \mathbf{r}_i como el vector que une al sitio j con su i -ésimo vecino. Cabe mencionar que $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ se conoce también como relación de dispersión. En el caso particular de una cadena lineal de átomos, la relación de dispersión de amarre fuerte a primeros vecinos ($t' = 0$) es

$$\varepsilon_0(k) = \alpha + 2t \cos(ka) \quad (2.10)$$

donde a es el parámetro de red.



En dos dimensiones, para una red cuadrada a primeros vecinos

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \alpha + 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) \quad (2.11)$$

y en tres dimensiones, para un red cúbica simple (*sc*) a primeros vecinos

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \alpha + 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)) \quad (2.12)$$

En estos casos, es fácil verificar que el ancho de la banda está dado por $2Z|t|$ donde Z es el número de primeros vecinos. Para una red triangular, tenemos seis primeros vecinos, quedando la relación de dispersión como

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \alpha + 2t \left[\cos(k_x a) + \cos\left(\frac{a}{2}[k_x + \sqrt{3}k_y]\right) + \cos\left(\frac{a}{2}[k_x - \sqrt{3}k_y]\right) \right]. \quad (2.13)$$

en este caso la relación de dispersión toma valores entre $-\alpha - 6|t|$ y $-\alpha + 3|t|$ por lo que ya no se cumple que el ancho de la banda es $2Z|t|$. Esto se debe a la frustración de estados *antibonding* como veremos más adelante.

Para el caso de una red triangular anisotrópica debemos tomar en cuenta a los segundos vecinos con integral de transferencia t' sólo sobre una diagonal como se muestra en la figura 2.1.

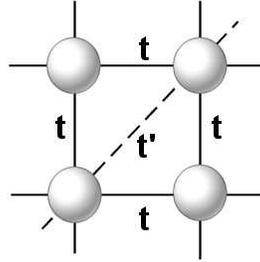
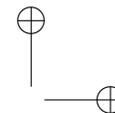
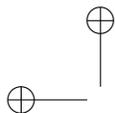


Figura 2.1: Celda unitaria de una red triangular anisotrópica donde los círculos indican los sitios de la red, y las líneas indican las integrales de transferencia t (línea sólida) y t' (línea punteada). Nótese que la integral de transferencia t' existe sólo en una de las dos diagonales. El caso $t' = 0$ que corresponde a una red cuadrada mientras que el caso $|t| = |t'|$ es topológicamente equivalente a una red triangular equilátera.

De esta manera obtenemos la siguiente relación de dispersión para una red triangular anisotrópica

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = 2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) + 2t' \cos(k_x a + k_y a) \quad (2.14)$$



2.2 Densidad de estados en redes triangulares

13

donde a es el parámetro de red y por simplicidad hemos tomado $\alpha = 0$

2.2. Densidad de estados en redes triangulares

Cabe mencionar que los resultados para los anchos de banda en el modelo de amarre fuerte para las redes lineal, cuadrada, cúbica y triangular son casos particulares de un resultado conocido como *Teorema de Perron-Frobenius* [ZIMAN, 1979]. Para deducir este resultado, reescribiremos el hamiltoniano como de amarre fuerte como:

$$H = \alpha \sum_i |i\rangle \langle i| + t \sum_{ij} |i\rangle \langle j| \quad (2.15)$$

donde $|i\rangle$ denota la función de Wannier centrada en el sitio i . Las soluciones de la ecuación de Schrödinger pueden escribirse en esta notación como

$$\psi = \sum_i c_i |i\rangle$$

quedando entonces las ecuaciones para encontrar los coeficientes c_i como

$$(E - \alpha)c_i = \sum_{j \neq i} tc_j \quad (2.16)$$

de donde

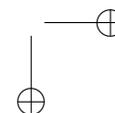
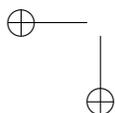
$$|(E - \alpha)||c_i| = \left| \sum_{j \neq i} tc_j \right| \leq \sum_{j \neq i} |t||c_j| \quad (2.17)$$

Dado que en un cristal ideal los sitios deben ser idénticos $|c_i| = |c_j|$

$$|E - \alpha| \leq Z|t| \quad (2.18)$$

donde Z es el número de primeros vecinos que tiene sitio, también conocido como coordinación local. Para una red bipartita, es decir, una red que puede subdividirse en dos subredes de modo que todos los primeros vecinos de una subred pertenecen a la otra y viceversa, el espectro de energías en el modelo de amarre fuerte es simétrico respecto de $E = \alpha$. En este caso, en la ecuación (2.16) i pertenece a una subred y j a la otra. Entonces, si el sistema puede tener una energía $E - \alpha$, $\alpha - E$ también será una energía posible.

Es posible resolver la ecuación de Schrödinger para el hamiltoniano (2.15) por medio de la función de Green, y todas las cantidades físicas



medibles de un sistema se pueden escribir en términos de dicha función [ECONOMOU, 1983]. La función de Green correspondiente al operador hermitiano lineal independiente del tiempo $H(\mathbf{r})$ y a la variable compleja $z = E + i\delta$, se define a través de la ecuación $(z - H)G = 1$. En el caso particular del hamiltoniano (2.15) con $\varepsilon(\mathbf{k})$ sus valores propios, y en la base ortonormal de las funciones de Wannier tenemos [ECONOMOU, 1983]

$$G(z) = (z - H)^{-1} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|}{z - \varepsilon(\mathbf{k})} \quad (2.19)$$

donde $|\mathbf{k}\rangle = N^{-\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{l}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} |\mathbf{l}\rangle$; $|\mathbf{k}\rangle$ y $|\mathbf{l}\rangle$ son las funciones de Bloch y Wannier respectivamente. Definimos así

$$G(l, m; z) \equiv \langle \mathbf{l} | G(z) | \mathbf{m} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle \mathbf{l} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \mathbf{m} \rangle}{z - \varepsilon(\mathbf{k})} \quad (2.20)$$

$$= \frac{1}{V_{1zB}} \int_{1zB} d\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)}}{z - \varepsilon(\mathbf{k})} \quad (2.21)$$

siendo $G(z)$ los elementos de matriz de G y donde V_{1zB} es el volumen de la primera zona de Brillouin y la integral se evalúa sobre la primera zona de Brillouin. Dado que H es observable (hermitiano), sus valores propios son reales así que las singularidades de la función anterior estarán sobre el eje real. Podemos calcular la función de Green $G(z)$ ya sea directamente de la definición $(z - H)G = 1$ o bien con la ecuación (2.19). Una vez que se conoce $G(z)$ es posible obtener información sobre los valores propios de H . La posición de los polos de $G(z)$ dará el conjunto discreto de de valores propios de H , y los residuos en estos polos darán información sobre la función propia correspondiente. De aquí en adelante, dada la gran cantidad de sitios en un cristal, consideraremos un espectro continuo E de valores propios de H . Asimismo, se puede demostrar que la densidad de estados para el sistema descrito por H es

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}(G^\pm(l, l, E)) \quad (2.22)$$

donde

$$G^\pm(\varepsilon) = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} G(\varepsilon \pm i\delta) \quad (2.23)$$

La $\rho(E)$ multiplicada por un incremento de energía dE da el número de estados posibles para un electrón con energía entre $E - dE$ y $E + dE$, estos estados pueden estar ocupados o desocupados. A manera de ejemplo, para el caso de una red lineal con parámetro de salto a primeros vecinos,

2.2 Densidad de estados en redes triangulares

15

sustituimos la relación de dispersión dada por (2.10) para obtener la traza de $G(z)$

$$G(l, m; z) = \frac{L}{2\pi N} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \frac{e^{ik(l-m)a}}{z - \alpha - 2t \cos(ka)}. \quad (2.24)$$

para concluir el cálculo de la densidad de estados en este sistema, es necesario evaluar la integral anterior [ECONOMOU, 1983] y sustituir en (2.22) para obtener

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}(G^\pm(l, l, E)) = \frac{\theta(2t - |E - \alpha|)}{\pi \sqrt{4t^2 - (E - \alpha)^2}} \quad (2.25)$$

donde θ es la función escalón. En este caso la densidad de estados tiene singularidades en $\alpha \pm 2t$ y los estados permitidos se encuentran dentro de estos límites (ver gráfica para $t'/|t| = 0$ en la figura 2.2).

Para una red cuadrada se obtiene

$$G(l, m; z) = \frac{a^2}{4\pi^2} \int_{1zB} d^2\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)}}{z - \alpha - 2t \cos[(k_x a) + \cos(k_y a)]}. \quad (2.26)$$

donde primera zona de Brillouin es el cuadrado $-\pi/a \leq k_x < \pi/a$ y $-\pi/a \leq k_y < \pi/a$ evaluando [ECONOMOU, 1983]

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} \text{Im}(G^\pm(l, l, E)) = \frac{2}{2\pi^2 t} \theta(2t - |E - \alpha|) \mathbf{K} \left(\sqrt{1 - \frac{(E - \alpha)^2}{4t^2}} \right) \quad (2.27)$$

Con \mathbf{K} denotando la integral elíptica completa de primera clase. Se puede ver una gráfica de esta función en la figura 2.3 (caso $t'/|t| = 0$) nótese la simetría respecto a $\alpha = 0$ y la singularidad. Nótese las singularidades en la función $\rho(E)$ las cuales provienen de aquellos puntos en el espacio k para los cuales $\nabla(E) = 0$, es decir, donde las superficies de energía son planas [IBACH and LÜTH, 1991]. Para el caso de la red triangular anisotrópica, en la figura 2.3 se muestra el cálculo numérico de la densidad de estados para distintos valores de $t'/|t|$ donde las singularidades vienen dadas por las tablas 2.1 y 2.2 que corresponden a t positiva y t negativa respectivamente. Dichas singularidades se encuentran a partir en aquellos puntos donde $\nabla \varepsilon_0(\mathbf{k}) = 0$, es decir

$$\frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_x} = -2t \text{sen}(k_x a) - 2t' \text{sen}(k_x a + k_y a) = 0, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_y} = -2t \text{sen}(k_y a) - 2t' \text{sen}(k_x a + k_y a) = 0. \quad (2.29)$$

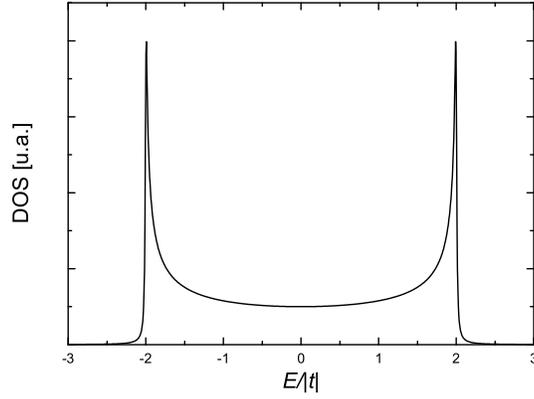


Figura 2.2: Densidad de estados para una cadena lineal, nótese la simetría respecto de cero y las singularidades en $E/|t| = \pm 2$

ε_0	$t' \leq -0.5 t (t' < 0)$	$0.5t < t' < t (t' > 0)$	$ t' \leq 0.5t$
Mínimo	$\varepsilon_0 = -4t + 2t'$	$-\frac{t^2}{t'} - 2t'$	$-4t + 2t'$
V.H.S 1	$\varepsilon_0 = -2t'$	$-4t + 2t'$	$-2t'$
V.H.S 2	$\varepsilon_0 = 4t + 2t'$	$-2t'$	$-2t'$
Máximo	$\varepsilon_0 = -\frac{t^2}{t'} - 2t'$	$4t + 2t'$	$4t + 2t'$

Tabla 2.1: Singularidades de van Hove de la densidad de estados para una red triangular anisotrópica $t > 0$.

	$t' \leq -0.5 t (t' < 0)$	$0.5 t < t' < t (t' > 0)$	$ t' \leq 0.5 t $
Mínimo	$\varepsilon_0 = 4t + 2t'$	$-\frac{t^2}{t'} - 2t'$	$4t + 2t'$
V.H.S 1	$\varepsilon_0 = -2t'$	$4t + 2t'$	$-2t'$
V.H.S 2	$\varepsilon_0 = -4t + 2t'$	$-2t'$	$-2t'$
Máximo	$\varepsilon_0 = -\frac{t^2}{t'} - 2t'$	$-4t + 2t'$	$-4t + 2t'$

Tabla 2.2: Singularidades de van Hove de la densidad de estados para una red triangular anisotrópica $t < 0$

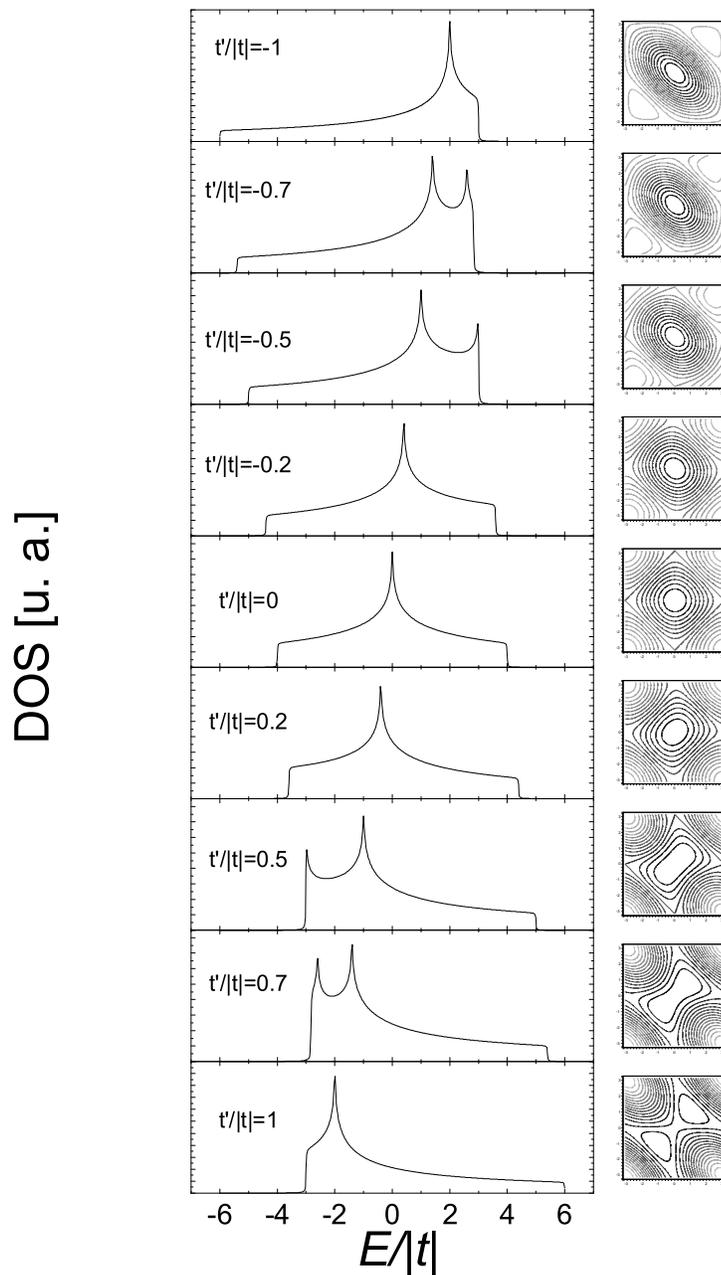


Figura 2.3: A la izquierda se muestra la densidad de estados electrónicos para diferentes valores de t' y a la derecha las respectivas curvas de nivel de $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ sobre la primera zona de Brillouin (por simplicidad hemos normalizado respecto al parámetro de red).

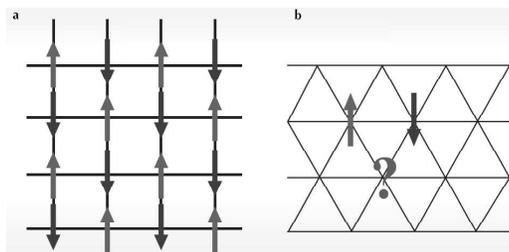


Figura 2.4: Sistema de espines en (a) una red cuadrada y (b) una red triangular equilátera, donde en el primer caso se muestra el estado base antiferromagnético mientras que en el segundo caso se muestra que tal estado está frustrado [MOESSNER and RAMIREZ, 2006].

Como ya mencionamos la densidad de estados de una red bipartita como lo es la red cuadrada ($t' = 0$) es simétrica con respecto a $E = 0$, mientras que para $t' \neq 0$ la densidad de estados pierde dicha simetría. Esto tiene su origen en la geometría del sistema, la cual provoca que ciertas simetrías de algunos estados electrónicos no puedan realizarse, es decir, dichos estados se ven frustrados y las energías correspondientes se vuelven inaccesibles. Para ver esto con más detalle, consideremos una red cuadrada ($t' = 0$) y una red triangular equilátera ($t' = t = -1$). En ambos casos la función de onda de una partícula correspondiente al estado base de un electrón descrito por un modelo de amarre fuerte tiene el mismo signo en todos los sitios. Por otra parte el estado de máxima energía de una red cuadrada tiene una función de onda cuya amplitud cambia de signo de sitio a sitio (estado *antibonding*). Sin embargo, en el caso de una red triangular tal configuración es imposible, tres sitios vecinos no pueden formar pares con signos opuestos y el sistema está frustrado. Lo mismo ocurre para sistemas de espines sobre redes como se muestra en la figura 2.4 donde en el caso de una red cuadrada (a) cada espín puede ser antiparalelo con todos sus vecinos formando un estado antiferromagnético, mientras que en el caso de una red triangular (b) tal configuración es imposible, es decir, no es posible dar una configuración de espines tales que para cada sitio sus primeros vecinos tengan espín opuesto y por lo tanto el estado antiferromagnético está frustrado.

Capítulo 3

Teoría Microscópica de la Superconductividad

La teoría BCS fue la primera teoría microscópica que pudo explicar la superconductividad en los ahora llamados superconductores convencionales y fue desarrollada por John Bardeen, Leon Cooper, y John Schrieffer en 1957 [BARDEEN *et al.*, 1957]. Esta teoría microscópica constituye un notable éxito de la teoría cuántica de los sólidos ya que explica de manera simple, aunque no trivial, los principales efectos de la superconductividad y está basada en la demostración de Cooper de que el estado normal de un mar de Fermi de electrones es inestable bajo cualquier interacción atractiva entre dos electrones sin importar cuan débil sea ésta [COOPER, 1956]. En los superconductores convencionales esta interacción atractiva es el resultado de la interacción *electrón-fonón* idea que surgió a partir del efecto isotópico, esto es que $T_c \propto M^{-\alpha}$ donde M es la masa de los iones y $\alpha \approx 0.5$ [MAXWELL, 1950][REYNOLDS *et al.*, 1950]. La investigación en materiales superconductores recibió un nuevo impulso con el descubrimiento de Bednorz y Müller en 1986 de compuestos cerámicos con temperaturas de transición que eventualmente superaron la temperatura del nitrógeno líquido ($77K$) alcanzando los $133K$ para el compuesto $HgBa_2Ca_2Cu_3O_8$ [PUTILIN *et al.*, 1993] [A. SCHILLING, 1993]. Esta T_c puede incrementarse hasta $164K$, si dicho compuesto se somete a presiones del orden de $30GPa$ [CHU *et al.*, 1993]. Las altas temperaturas críticas así como los valores pequeños de α hallados en estos materiales, sugieren que el mecanismo fonónico no es necesariamente el origen del apareamiento en los cupratos superconductores y que dicho mecanismo podría ser de origen electrónico [ANDERSON, 1987].

Sin embargo, cabe señalar que dentro del formalismo de Eliashberg existen argumentos que impiden descartar por completo al mecanismo fonónico [CARBOTTE, 1990]. Por otra parte existe una gran variedad de superconductores no convencionales tales como los conductores moleculares, incluyendo orgánicos y fullerenos, los compuestos de fermiones pesados y el rutenato de estroncio Sr_2RuO_4 en los que tampoco existe consenso sobre el mecanismo que da lugar a la formación de pares. Sin embargo, el origen de dicha interacción no es crucial para que el formalismo BCS se sostenga, por lo que las ideas generales de esta teoría no están del todo excluidas como una posible explicación de la superconductividad en estos materiales.

3.1. Pares de Cooper

Observando los resultados de la teoría fenomenológica de la superconductividad, se puede apreciar que la carga del electrón siempre aparece multiplicada por un factor de dos. Esto sugiere que la superconductividad se debe a pares de electrones, la creación de pares de electrones a partir de una interacción atractiva entre ellos es el objeto de la presente sección.

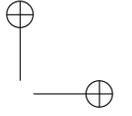
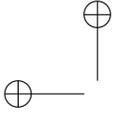
La idea básica de que incluso una atracción débil entre electrones es capaz de formar pares fue introducida por Cooper en 1956 [COOPER, 1956]. Cooper mostró que un mar de Fermi tiende a formar por lo menos un par sin importar qué tan débil sea la interacción, siempre y cuando sea atractiva.

Supongamos un mar de Fermi a $T = 0$ al cual se le han añadido dos electrones. Partimos de la suposición de que estos nuevos electrones interactúan entre ellos mas no con el mar de Fermi excepto por el principio de exclusión, de modo que lo que buscamos es la función de onda de dos partículas.

Esperamos además que el estado base tenga momento total cero, así que los electrones deben tener momentos iguales y opuestos. Tomando esto en cuenta, construimos una función de onda del tipo

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2} \quad (3.1)$$

dado que las partículas en cuestión son fermiones, la función de onda debe ser antisimétrica respecto del intercambio de partículas lo cual nos da como opciones: un estado de triplete con dependencia antisimétrica respecto del intercambio de \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 o bien, un estado singulete con dependencia simétrica respecto del intercambio de \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 . Anticipándonos al efecto de la interacción atractiva, esperamos un acoplamiento de singulete (simetría s)



3.1 Pares de Cooper

21

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \left(\sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_F} g_{\mathbf{k}} \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right) (\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2) \quad (3.2)$$

donde α_i y β_i se refieren a los estados de espín hacia arriba y hacia abajo, respectivamente, para la i -ésima partícula.

Al introducir esta función de onda en la ecuación de Schrödinger correspondiente se obtiene la siguiente relación [TINKHAM, 2004] para los valores propios de la energía E y los coeficientes $g_{\mathbf{k}}$

$$(E - 2\epsilon_{\mathbf{k}})g_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}' > \mathbf{k}_F} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \quad (3.3)$$

donde $\epsilon_{\mathbf{k}}$ corresponde a la (relación de dispersión de una partícula con momento k) energía de una onda plana para una partícula en el estado \mathbf{k} y $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ es el potencial necesario para dispersar un par de electrones con momento $(\mathbf{k}', -\mathbf{k}')$ a momento $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$.

Dado que el análisis del potencial $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ resultaría complicado, para facilitar los cálculos, Cooper introdujo la siguiente aproximación:

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V & \text{Si } 0 \leq \epsilon_{\mathbf{k}} - E_F \leq \hbar\omega_c \\ & \text{y } 0 \leq \epsilon_{\mathbf{k}'} - E_F \leq \hbar\omega_c \\ 0 & \text{Cualquier otro caso} \end{cases} \quad (3.4)$$

Es decir, sólo intervienen aquellos electrones que se encuentran en una banda de ancho $2\hbar\omega_c$ centrada en la energía de Fermi

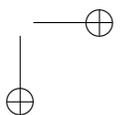
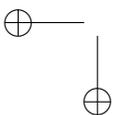
Entonces a partir de la ecuación (3.3) podemos escribir

$$g_{\mathbf{k}} = V \frac{\sum g_{\mathbf{k}'}}{2\epsilon_{\mathbf{k}} - E} \quad (3.5)$$

sumando sobre \mathbf{k} ambos lados de la ecuación

$$\frac{1}{V} = \sum_{\mathbf{k}' > \mathbf{k}_F} (2\epsilon_{\mathbf{k}'} - E)^{-1} \quad (3.6)$$

reemplazando la suma por una integral y llamando $N(0)$ a la densidad de estados para la energía de Fermi (tomando en cuenta una única orientación de espín) tenemos



$$\frac{1}{V} = N(0) \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_c} \frac{d\epsilon}{2\epsilon - E} = \frac{1}{2} N(0) \ln \frac{2E_F - E + 2\hbar\omega_c}{2E_F - E} \quad (3.7)$$

En la mayoría de los superconductores clásicos se encuentra que $N(0)V < 0.3$ entonces, haciendo uso de la aproximación de acoplamiento débil válida para $N(0)V \ll 1$ [TINKHAM, 2004] tenemos

$$e^{2/N(0)V} = \frac{2E_F - E + 2\hbar\omega_c}{2E_F - E} = 1 + \frac{2\hbar\omega_c}{2E_F - E} \approx \frac{2\hbar\omega_c}{2E_F - E} \quad (3.8)$$

reescribiendo la ecuación anterior

$$E \approx 2E_F - 2\hbar\omega_c e^{-2/N(0)V} \quad (3.9)$$

La ecuación anterior predice la existencia de un estado ligado con energía negativa respecto de la superficie de Fermi, formado por electrones cuya energía cinética es mayor que la energía de Fermi. En otras palabras, mientras exista una interacción atractiva entre las partículas añadidas al mar y sin importar qué tan pequeña sea, habrá tendencia a minimizar la energía formando pares.

Volviendo a la ecuación de onda (3.2), se puede observar que ésta es proporcional a

$$\sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_F} \frac{\cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}{2\xi_{\mathbf{k}} + \epsilon'} \quad (3.10)$$

donde $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - E_F$, E' se refiere a la energía medida respecto del nivel de Fermi: $E' = 2E_F - E > 0$. (Los coeficientes $g_{\mathbf{k}}$ sólo dependen de $\xi_{\mathbf{k}}$ por lo que la solución tiene simetría esférica es un estado S así como el singulete.)

El factor $(2\xi_{\mathbf{k}} + E')^{-1}$ alcanza su valor máximo $1/E'$ cuando $\xi_{\mathbf{k}} = 0$ (electrones con energía de Fermi) y disminuye para valores más grandes de $\xi_{\mathbf{k}}$. De modo que aquellos estados con energía $\sim E'$ por encima de E_F son los más importantes en la formación de pares. El hecho de que $E' \ll \hbar\omega_c$ cuando $N(0) \ll 1$, muestra que el comportamiento de $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ fuera de la banda $\hbar\omega_c$ alrededor de E_F no tiene gran efecto en el resultado.

Podemos estimar el tamaño de un par utilizando como argumento el principio de incertidumbre $\Delta p \approx \frac{E'}{v_F}$ donde v_F es la velocidad de Fermi, esto nos lleva a que $\Delta x \gtrsim \frac{\hbar}{\Delta p} \approx \frac{\hbar v_F}{E'}$ por lo que un par no puede ser menor que $\frac{\hbar v_F}{E'}$. Resulta ser que kT_c (T_c es la temperatura crítica) es del orden de E' así que el tamaño de un par de Cooper es aproximadamente $\xi_0 = \frac{\hbar v_F}{kT_c}$

3.2 Formalismo de segunda cuantización

23

donde a es una constante del orden de la unidad a determinar. Escrito de otra manera

$$\xi = \frac{\hbar^2 k_F}{mE'} \approx 10^3 \text{ \AA} \quad (3.11)$$

donde k_F es el momento para una partícula en el nivel de Fermi, m es una constante a determinar.

En el caso de los superconductores clásicos, se considera que el origen de la interacción atractiva se debe a interacciones electrón-fonón. Esto es, por deformaciones de la red al paso de los electrones. Bajo esta suposición de interacción fonónica, un electrón que se dispersa de momento \mathbf{k} a momento \mathbf{k}' por conservación de momento el fonón debe tener momento igual a $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$. Por esta razón, se espera que la energía de corte $\hbar\omega_c$ sea del orden de la energía de Debye $\hbar\omega_D$.

3.2. Formalismo de segunda cuantización

La forma de escribir una función de onda que describa un sistema de N fermiones no interactuantes es utilizando determinantes de Slater

$$\Phi(\zeta_1, \dots, \zeta_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{\varepsilon_1}(\zeta_1) & \cdots & \varphi_{\varepsilon_1}(\zeta_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{\varepsilon_N}(\zeta_1) & \cdots & \varphi_{\varepsilon_N}(\zeta_N) \end{vmatrix} \quad (3.12)$$

donde $\varphi_{\varepsilon_i}(\zeta)$ forman un conjunto completo ortonormal de funciones de onda de una sola partícula en el estado ε_i y ζ representa todas las coordenadas de la partícula, tanto espaciales como la proyección del espín sobre el eje z ; $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ es el factor de normalización. La función de onda $\Phi(\zeta_1, \dots, \zeta_N)$ así definida es antisimétrica bajo el intercambio de coordenadas de dos partículas.

Con la finalidad de simplificar el trabajo de lidiar con determinantes de Slater, se introducen los operadores de creación c_i^+ y aniquilación c_i que actúan sobre el espacio de Hilbert generado por los vectores $|n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle$ donde n_i es el número de ocupación del estado ε_i , pudiendo valer 0 o 1. Estos operadores cumplen con las siguientes reglas

$$c_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \delta_{1, n_i} (-1)^{S(1, i-1)} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \quad (3.13)$$

Este operador, de aniquilación del i -ésimo estado, no es hermitiano y operador su adjunto cumple

$$c_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \delta_{0, n_i} (-1)^{S(1, i-1)} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle. \quad (3.14)$$

El operador de creación agrega una partícula al estado i si el estado se encontraba vacío.

En ambas ecuaciones (3.14) y (3.13) tenemos que $S(m, n)$ se refiere a la suma de los números de ocupación desde el estado m hasta el estado n , es decir

$$S(m, n) \equiv \sum_{k=m}^n n_k . \quad (3.15)$$

A partir de las relaciones anteriores, se puede encontrar que

$$\langle \dots, n_i, \dots | c_i^+ c_i | \dots, n_i, \dots \rangle = n_i \quad (3.16)$$

$$\langle \dots, n_i, \dots | c_i c_i^+ | \dots, n_i, \dots \rangle = 1 - n_i . \quad (3.17)$$

Particularmente al operador $\hat{N} \equiv c_i^+ c_i$ se le conoce como operador de número, siendo n_i sus valores propios.

En una notación más general, con σ representando el espín, las propiedades de los operadores de creación y aniquilación se pueden resumir como reglas de anticonmutación para operadores fermiónicos

$$\{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}^+\} \equiv c_{i\sigma} c_{j\sigma'}^+ + c_{j\sigma'}^+ c_{i\sigma} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (3.18)$$

y

$$\{c_{i\sigma}, c_{j\sigma'}\} = \{c_{i\sigma}^+, c_{j\sigma'}^+\} = 0 . \quad (3.19)$$

3.3. Formalismo a $T = 0$

El problema que ataca el formalismo BCS es el de encontrar el estado en el cual cesa la formación de pares para electrones cuya energía está por encima de la del mar de Fermi. Es decir, encontrar el momento en que el sistema está ya tan diferente del mar de Fermi debido al número de pares formados, que es imposible formar un par más. Para comenzar, necesitamos una función de onda, y el caso más general para una función de onda de N electrones formando $N/2$ pares de Cooper es la siguiente

$$|\psi_N\rangle = \sum g(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_l) c_{\mathbf{k}_1, \uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}_1, \downarrow}^+ \cdots c_{\mathbf{k}_l, \uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}_l, \downarrow}^+ |0\rangle , \quad (3.20)$$

donde $|0\rangle$ es la función de onda del vacío, carente de partículas. \mathbf{k}_i y \mathbf{k}_l denotan el primero y el último de los M de \mathbf{k} que se encuentran ocupados para

3.3 Formalismo a $T = 0$

25

un término dado de la suma. Los coeficientes g denotan el peso probabilístico de encontrar una configuración dada de $N/2$ pares. La suma se realiza sobre todos los valores \mathbf{k} de la banda. Esta función de onda presenta un problema, y es que el número de maneras en las que podemos escoger $N/2$ estados de ocupación para los pares es del orden de $10^{10^{20}}$ configuraciones [TINKHAM, 2004], implicando que debemos determinar esa misma cantidad de coeficientes g . Es por esta razón que BCS toma como su función de estado base (utilizando la notación de segunda cuantización) como

$$|\psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+ \right) |0\rangle, \quad (3.21)$$

done $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. De esta manera, la probabilidad de encontrar el estado de un par de electrones con momentos $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$ ocupado es $|v_{\mathbf{k}}|^2$ mientras que la probabilidad de encontrar el mismo estado desocupado es $|u_{\mathbf{k}}|^2$. En esta función de onda se ha introducido la aproximación de que la ocupación de un estado \mathbf{k} depende solamente de la ocupación promedio de los demás estados. Cabe notar que esta función de onda no es valor propio del operador de número total \hat{N} , por lo que presenta un número de partículas variable. Esta aproximación relaja la condición de que el número de partículas N sea fijo. El error cometido al mantener fijo únicamente el número promedio de partículas \bar{N} no es relevante dado el gran número de partículas con la que se trabaja.

En esta sección aplicaremos el método variacional al hamiltoniano de BCS, como se hizo en el trabajo original, para obtener valores para v_k y u_k de ψ_G

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+ c_{\mathbf{k}',\uparrow} c_{-\mathbf{k}',\downarrow}, \quad (3.22)$$

Para determinar el número medio de partículas, es necesario minimizar el valor de expectación de $\langle \Psi_G | H_{BCS} - \mu \hat{N} | \Psi_G \rangle$ con respecto de $v_{\mathbf{k}}$ y con este fin se ha introducido el potencial químico μ . Buscamos

$$\delta \langle \Psi_G | H - \mu N | \Psi_G \rangle = \delta \left[2 \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \right] = 0. \quad (3.23)$$

Será conveniente definir

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}, \quad (3.24)$$

y

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}. \quad (3.25)$$

Donde además hemos definido la energía de una sola partícula medida respecto del nivel de Fermi como $\xi(\mathbf{k}) \equiv \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$. Con estas definiciones $E_{\mathbf{k}}$ resultará ser la energía de excitación de una cuasipartícula con momento $\hbar\mathbf{k}$ y $\Delta_{\mathbf{k}}$ será prácticamente independiente de \mathbf{k} convirtiéndose en la mínima energía de excitación o bien *gap energético*.

Si tomamos la condición $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ para hacer

$$u_{\mathbf{k}} = \text{sen}\theta_{\mathbf{k}} \text{ y } v_{\mathbf{k}} = \text{cos}\theta_{\mathbf{k}} \quad (3.26)$$

tenemos que

$$\langle \Psi_G | H - \mu N | \Psi_G \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu) v_{\mathbf{k}}^2 + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \quad (3.27)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k})(1 + \text{cos}2\theta_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{4N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \text{sen}2\theta_{\mathbf{k}} \text{sen}2\theta_{\mathbf{k}'} \quad (3.28)$$

y al minimizar respecto de $\theta_{\mathbf{k}}$

$$\frac{\partial \langle \Psi_G | H - \mu N | \Psi_G \rangle}{\partial \theta_{\mathbf{k}}} = 0 = -2 \xi(\mathbf{k}) \text{sen}2\theta_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \text{cos}2\theta_{\mathbf{k}} \text{sen}2\theta_{\mathbf{k}'}. \quad (3.29)$$

de donde podemos obtener

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \text{sen}2\theta_{\mathbf{k}'}}{2\xi_{\mathbf{k}}} \quad (3.30)$$

entonces (3.24) queda como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \text{sen}2\theta_{\mathbf{k}'}, \quad (3.31)$$

además

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\xi_{\mathbf{k}}} \quad (3.32)$$

de modo que

$$2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \text{sen}2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \quad (3.33)$$

3.3 Formalismo a $T = 0$

27

y

$$v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2 = \cos 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \quad (3.34)$$

podemos recuperar los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ utilizando (3.34) y que $u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$ como

$$v_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right)} \quad (3.35)$$

y

$$u_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right)}. \quad (3.36)$$

Es importante remarcar que los signos del seno y coseno en las ecuaciones (3.33) y (3.34) respectivamente, han sido tomados de manera que si $\xi_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$ entonces $v_{\mathbf{k}} \rightarrow 0$ para que el sistema tenga sentido físico. Notemos ahora que la ecuación (3.24) tiene la forma de una condición de autoconsistencia, pues $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ dependen a su vez de $\Delta_{\mathbf{k}}$. Sustituyendo (3.33) en (3.31) obtendremos de manera explícita la condición de autoconsistencia sobre $\Delta_{\mathbf{k}}$ como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}'}}. \quad (3.37)$$

En este punto podemos observar que si hacemos $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$ tendremos que $v_{\mathbf{k}} = 1$ para $\xi_{\mathbf{k}} < 0$ y $v_{\mathbf{k}} = 0$ para $\xi_{\mathbf{k}} > 0$, esto es, tendremos ocupados todos los estados hasta el nivel de Fermi. En otras palabras, la solución trivial $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$ representa un mar de Fermi a $T = 0$. Para obtener una solución no trivial, retomamos la aproximación hecha por Cooper para $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V & \text{Si } |\xi_{\mathbf{k}}| \text{ y } |\xi_{\mathbf{k}'}| \leq \hbar\omega_c \\ 0 & \text{Cualquier otro caso} \end{cases} \quad (3.38)$$

donde V es una constante positiva. Introduciendo (3.38) en (3.37) tenemos

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \Delta & \text{Si } |\xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_c \\ 0 & \text{Si } |\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_c \end{cases} \quad (3.39)$$

esto significa que $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta$ será independiente de \mathbf{k} y así la ecuación (3.37) queda finalmente como

$$1 = \frac{V}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}}. \quad (3.40)$$

Reemplazando la suma por una integral desde $-\hbar\omega_c$ hasta $\hbar\omega_c$ y aprovechando la simetría de $\pm\xi$ en la ecuación anterior, tenemos

$$\frac{1}{N(0)V} = \int_0^{\hbar\omega_c} \frac{d\xi}{(\Delta^2 + \xi^2)^{1/2}} = a \operatorname{senh} \frac{\hbar\omega_c}{\Delta} \quad (3.41)$$

despejando Δ

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_c}{\operatorname{senh}[1/N(0)V]} \quad (3.42)$$

En lo que se conoce como límite de interacción débil $N(0) \ll 1$ (típicamente se tiene que $N(0) \lesssim 0.3$ [TINKHAM, 2004]) tenemos el siguiente resultado

$$\Delta \approx 2\hbar\omega_c e^{-1/N(0)V} \quad (3.43)$$

Una vez que se han determinado los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ ha quedado determinada $|\Psi_G\rangle$. De modo que ahora se puede calcular la energía del estado base E_G a partir de la Ec. ((3.27)) como

$$E_G = \langle \Psi_G | H | \Psi_G \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi(\mathbf{k}) - \frac{\xi^2(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E(\mathbf{k})} + \mu N. \quad (3.44)$$

podemos calcular el número medio de partículas como sigue

$$N = \langle \Psi_G | \hat{N} | \Psi_G \rangle = \left\langle \Psi_G \left| \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \right| \Psi_G \right\rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \quad (3.45)$$

y sustituyendo (3.35) en la ecuación anterior

$$N = \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right), \quad (3.46)$$

si definimos como n al número promedio de partículas por sitio, es decir, $n = N/N_s$, la ecuación anterior se reescribe como

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\xi(\mathbf{k}) - \mu}{E(\mathbf{k})}, \quad (3.47)$$

Tendremos dos estados excitados del sistema, la excitación de una sola partícula y la excitación de un par de partículas sobre el estado base, ambas excitaciones deberán ser descritas por funciones de onda diferentes. Para el caso de la excitación de una partícula tenemos

$$|\Psi_{ex1}\rangle = c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \left(u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}',\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}',\downarrow}^+ \right) |0\rangle, \quad (3.48)$$

3.3 Formalismo a $T = 0$

29

y para la excitación de dos partículas

$$|\Psi_{ex2}\rangle = \left(v_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+ \right) \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} \left(u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}',\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}',\downarrow}^+ \right) |0\rangle, \quad (3.49)$$

Podemos calcular las energías de excitación tanto de una partícula o de un par como

$$E_{ex} = \langle \Psi_{ex} | H - \mu \hat{N} | \Psi_{ex} \rangle - \langle \Psi_G | H - \mu \hat{N} | \Psi_G \rangle \quad (3.50)$$

Evaluando estas funciones de onda como se indica en la relación anterior tenemos

$$E_{ex1}(\mathbf{k}) = \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} = E(\mathbf{k}), \quad (3.51)$$

$$E_{ex2}(\mathbf{k}) = 2\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} = 2E(\mathbf{k}). \quad (3.52)$$

Así, el espectro de excitaciones basado en el estado (3.21), exhibe cuasi-partículas de energía $E_{\mathbf{k}}$ con una brecha de energía $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ [PÉREZ, 2002].

Es posible encontrar una solución exacta cuando tratamos el límite de baja densidad, donde la ecuación BCS de la brecha superconductor (3.37) se reduce a la ecuación de Schrödinger para un solo par [EAGLES, 1969] [MICNAS *et al.*, 1990] Para probar este caso haremos la siguiente definición

$$\phi(\mathbf{k}) \equiv \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E(\mathbf{k})}. \quad (3.53)$$

así podemos reescribir (3.37) como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \phi(\mathbf{k}'), \quad (3.54)$$

multiplicando ambos lados por $2\xi(\mathbf{k})/E(\mathbf{k})$ tenemos

$$2\xi(\mathbf{k})\phi(\mathbf{k}) = -\frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \phi(\mathbf{k}'), \quad (3.55)$$

si hacemos

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

y comparando la relación anterior con (3.46) podemos ver que $\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = n$. Reescribimos entonces (3.55) como

$$2\xi(\mathbf{k})\phi(\mathbf{k}) = -(1 - n_{\mathbf{k}}) \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \phi(\mathbf{k}') \quad (3.56)$$

En el límite de bajas densidades $n_{\mathbf{k}} \ll 1$ y dado que $\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$, la ecuación anterior queda como

$$[2\mu - 2\varepsilon(\mathbf{k})] \phi_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \phi(\mathbf{k}'). \quad (3.57)$$

La ecuación anterior (3.57) es la ecuación de Schrödinger para un solo par en el espacio recíproco, donde 2μ juega el papel del eigenvalor [PÉREZ, 2002]

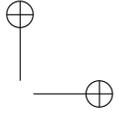
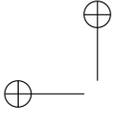
La ganancia de energía en el estado base de BCS con electrones apareados, respecto de la de un mar de Fermi sin apareamiento es [TINKHAM, 2004]

$$U_s(0) - U_n(0) = -\frac{1}{2} N(0) \Delta^2(0) \quad (3.58)$$

Donde hemos denotado $U(T)$ a la energía interna del sistema y anticipado que $\Delta = \Delta(T)$ será dependiente de la temperatura. La ecuación (3.43) muestra que Δ es proporcional a $\hbar\omega_c$. Para diferentes isótopos del mismo elemento se ha encontrado que ω_c es proporcional a $M^{-\frac{1}{2}}$ (M es la masa atómica). Al ser (3.58) la energía que debemos vencer para destruir el estado superconductor, ya sea con temperatura o con un campo magnético, el valor de H_c variará como $M^{-\alpha}$ donde $\alpha \approx \frac{1}{2}$. Esta dependencia de H_c (o T_c) se conoce como efecto isótopo. El coeficiente α es prácticamente $\frac{1}{2}$ para los superconductores clásicos, sin embargo se ha encontrado que en otros materiales puede variar hasta cero e incluso cambiar de signo [TINKHAM, 2004].

3.4. Formalismo a $T \neq 0$

En la sección anterior se bosquejó el formalismo BCS usando el método variacional para obtener resultados a temperatura cero. Ahora trataremos el problema pero desde un enfoque moderno utilizando una transformación canónica en vez de utilizar el método variacional. El hamiltoniano característico de BCS nos lleva a un estado base que es hasta cierto punto una superposición coherente de estados de muchas partículas, donde tendremos pares $(\mathbf{k} \uparrow, \mathbf{k} \downarrow)$ ocupados o bien desocupados. Es por esto que operadores como $c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow}$ tendrán valores de expectación distintos de cero; además, debido al gran número de partículas involucradas, las fluctuaciones alrededor de los valores esperados deberán ser pequeñas así que despreciaremos fluctuaciones a segundo orden. Esta técnica se conoce como aproximación de campo medio, y está diseñada para reproducir los resultados a temperatura cero. Comenzaremos reescribiendo



3.4 Formalismo a $T \neq 0$

31

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

donde $b_{\mathbf{k}} \equiv \langle c_{\mathbf{k},\uparrow}c_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle$. Si aplicamos esta aproximación hamiltoniano de BCS (3.22) y agregamos el potencial químico para fijar el número medio de partículas, tendremos

$$\begin{aligned} H_{CM} - \mu\hat{N} &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(b_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+ + b_{\mathbf{k}'}^* c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} - b_{\mathbf{k}'}^* b_{\mathbf{k}} \right) \\ &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi(\mathbf{k}) n_{\mathbf{k},\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+ + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} - \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^* \right), \end{aligned} \quad (3.59)$$

donde

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}'} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle, \quad (3.60)$$

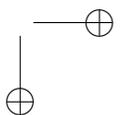
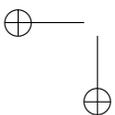
que de manera análoga a (3.24), también resultará ser la brecha superconductora. El hamiltoniano (3.59) puede ser diagonalizado introduciendo nuevos operadores fermiónicos $\gamma_{\mathbf{k}0}$ y $\gamma_{\mathbf{k}1}$ mediante la transformación canónica de Bogoliubov

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k},\uparrow} &= u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^+, \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^+ &= -v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \end{aligned}$$

donde nuevamente los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ deben satisfacer

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (3.61)$$

Cabe notar que el operador $\gamma_{\mathbf{k}0}$ participa en la destrucción de un electrón $\mathbf{k} \uparrow$ o en crear uno con $-\mathbf{k} \downarrow$, en ambos casos se reduce en \mathbf{k} el momento total del sistema y S_z se reduce por $\hbar/2$. Al contrario del operador $\gamma_{\mathbf{k}1}$ que tiende a aumentar el momento total por k así como también S_z por $\hbar/2$. Sustituyendo (3.61) en (3.59), y realizando las operaciones indicadas tomando en cuenta las propiedades de anticonmutación de los operadores fermiónicos, obtenemos



$$\begin{aligned}
 H_{CM} - \mu \hat{N} &= \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) [(|u_{\mathbf{k}}|^2 - |v_{\mathbf{k}}|^2) (\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}) + 2 |v_{\mathbf{k}}|^2 \\
 &+ 2u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0} + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}^+] \\
 &+ \sum_{\mathbf{k}} [(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}) (\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \gamma_{\mathbf{k}1} - 1) \\
 &+ (\Delta_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{*2} - \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^{*2}) \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0} + (\Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2) \gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}^+ + \Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^+] . \quad (3.62)
 \end{aligned}$$

Si escogemos $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ de tal forma que los coeficientes de $\gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}$ y $\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}^+$ en la ecuación anterior sean cero, entonces habremos diagonalizado el hamiltoniano. Esto es, habremos llevado el hamiltoniano a una forma en la que sólo contiene constantes y términos proporcionales a los números de ocupación $\gamma_{\mathbf{k}}^+ \gamma_{\mathbf{k}}$. Conseguiremos lo anterior resolviendo la siguiente ecuación

$$2\xi(\mathbf{k})u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}^2 - \Delta_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}^2 = 0. \quad (3.63)$$

Multiplicando ambos lados de la ecuación anterior por $\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{u_{\mathbf{k}}^2}$ y resolviendo el cuadrado, la condición anterior se convierte en

$$\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = \sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} - \xi(\mathbf{k}) \equiv E(\mathbf{k}) - \xi(\mathbf{k}), \quad (3.64)$$

donde se ha tomado el signo positivo de la raíz para que corresponda a una solución estable de mínima energía en lugar de un máximo. Retomando la condición de normalización $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ y que $|v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}| = (E(\mathbf{k}) - \xi(\mathbf{k})) / |\Delta_{\mathbf{k}}|$ (de la ecuación (3.64)) podemos recuperar los coeficientes

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 - |u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right), \quad (3.65)$$

que concuerdan con el resultado anterior ((3.35) y (3.36)) obtenido mediante el método variacional. Aunque las fases de $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ y $\Delta_{\mathbf{k}}$ son individualmente arbitrarias, están relacionadas por (3.64) ya que $\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}$ es real. Esto es, la fase de $v_{\mathbf{k}}$ relativa a $u_{\mathbf{k}}$ debe ser la fase de $\Delta_{\mathbf{k}}$. Sin pérdida de generalidad podemos escoger como valores reales y positivos todos los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y obligar así que $v_{\mathbf{k}}$ y $\Delta_{\mathbf{k}}$ tengan la misma fase. Una vez determinados los coeficientes $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ a modo de que diagonalicen (3.62), podemos reescribir el hamiltoniano como

$$\begin{aligned}
 H_{CM} - \mu \hat{N} &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}) - \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^* b_{\mathbf{k}'} \right) + \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) (\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}) \\
 &\quad (3.66)
 \end{aligned}$$

3.4 Formalismo a $T \neq 0$

33

la primera suma de este hamiltoniano es un término constante que difiere de la suma correspondiente para el estado normal a $T = 0$ ($E_{\mathbf{k}} = |\xi_{\mathbf{k}}|, \Delta_{\mathbf{k}} = 0$) exactamente por la energía de condensación (3.58). El segundo término del hamiltoniano se refiere al incremento de energía sobre el estado base en función de los operadores $\gamma_{\mathbf{k}}^+ \gamma_{\mathbf{k}}$ para los fermiones $\gamma_{\mathbf{k}1}$. De modo que $\gamma_{\mathbf{k}}$ describe excitaciones elementales de cuasipartículas (conocidas también como *Bogoliubones*) cuya energía de excitación es $E(\mathbf{k}) = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$, y nuevamente se puede apreciar que $\Delta_{\mathbf{k}}$ representa una brecha energética o bien, el mínimo de energía de excitación. El hamiltoniano (3.66) determina las propiedades del sistema en términos de los $b_{\mathbf{k}}$ pero aún se deben determinar dichos números, pues de la misma forma que en el desarrollo variacional, requerimos autoconsistencia al reinsertar los términos $b_{\mathbf{k}}$ nuevamente en (3.60). Dichos términos son los promedios cuántico y termodinámico de los operadores $c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow}$ cuando el sistema está descrito por $H_{CM} - \mu \hat{N}$. En mecánica estadística cuántica se demuestra que tales promedios están dados por [PATHRIA, 1972]

$$b_{\mathbf{k}} \equiv \langle c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle = \frac{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu \hat{N} \right) \right] c_{\mathbf{k},\uparrow} c_{-\mathbf{k},\downarrow} \right\}}{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu \hat{N} \right) \right] \right\}}, \quad (3.67)$$

donde $\text{Tr}\{\dots\}$ denota a la traza del operador entre paréntesis en el espacio de Hilbert de los eigenestados de $H_{CM} - \mu \hat{N}$ y $\beta \equiv 1/k_B T$. Reescribiendo los operadores $c_{\mathbf{k}}$ en términos de los operadores $\gamma_{\mathbf{k}}$, despreciando términos diagonales ($\gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}1}^+$ y $\gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}0}$), la traza puede evaluarse y se obtiene

$$\begin{aligned} b_{\mathbf{k}} &= \frac{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu \hat{N} \right) \right] \left(-u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^+ \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1} \gamma_{\mathbf{k}1}^+ \right) \right\}}{\text{Tr} \left\{ \exp \left[-\beta \left(H_{CM} - \mu \hat{N} \right) \right] \right\}} \\ &= u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \{ 1 - 2f[E(\mathbf{k})] \}, \end{aligned} \quad (3.68)$$

donde

$$f[E(\mathbf{k})] = \frac{1}{e^{E(\mathbf{k})/k_B T} + 1}, \quad (3.69)$$

es la función de Fermi-Dirac, como era de esperarse, pues habíamos identificado a $E(\mathbf{k})$ como la energía de excitación de una cuasipartícula fermiónica. El denominador contiene $\exp(E(\mathbf{k})/k_B T)$ en vez de $\exp([E(\mathbf{k}) - \mu]/k_B T)$. La razón física es que $\gamma_{\mathbf{k}0}^+$ (o $\gamma_{\mathbf{k}1}^+$) crea un estado excitado pero no cambia el número de partículas. Por otra parte, dado que $E(\mathbf{k}) > \Delta$, $f[E(\mathbf{k})]$ tiende a cero a $T = 0$ para toda \mathbf{k} en el espacio recíproco. Aún en el estado normal, la función de Fermi-Dirac ya no está describiendo la ocupación de

estados electrónicos independientes, más bien describe excitaciones del mar de Fermi a $T = 0$. Sustituyendo las ecuaciones (3.68), y (3.65) en (3.60), la ecuación de la brecha superconductor a temperaturas finitas queda como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E(\mathbf{k}')} \{1 - 2f[E(\mathbf{k}')] \},$$

de manera análoga, podemos generalizar la ecuación (3.47) como

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E(\mathbf{k})} \{1 - 2f[E(\mathbf{k}')] \}.$$

Finalmente las dos ecuaciones anteriores se pueden reescribir como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E(\mathbf{k}')} \tanh \left[\frac{E(\mathbf{k}')}{2k_B T} \right], \quad (3.70)$$

y

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E(\mathbf{k})} \tanh \left[\frac{E(\mathbf{k}')}{2k_B T} \right], \quad (3.71)$$

donde (3.70) y (3.71) describen el estado superconductor a temperatura finita. Dados $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, n y T , dichas ecuaciones deben resolverse para determinar $\Delta_{\mathbf{k}}(n, T)$ y $\mu(n, T)$. La temperatura crítica es aquella para la cual $\Delta(T) \rightarrow 0$, en este caso, $E(\mathbf{k}) \rightarrow |\xi_{\mathbf{k}}|$. Haciendo las aproximaciones de BCS ($V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -V$ y $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}'} = \Delta$), reemplazando $E(\mathbf{k})$ por $|\xi_{\mathbf{k}}|$ y finalmente cambiando la suma por una integral sobre (3.70) encontramos

$$\frac{1}{N(0)V} = \int_0^{\beta_c \hbar \omega_c / 2} \frac{\tanh x}{x} dx = \ln(A \beta_c \hbar \omega_c), \quad (3.72)$$

donde $A = 2e^\gamma / \pi \approx 1.13$ y $\gamma = 0.577\dots$ es la constante de Euler. Despejando,

$$k_B T_c = \beta_c^{-1} \approx 1.13 \hbar \omega_c e^{-1/N(0)V}, \quad (3.73)$$

y comparando esta ecuación con (3.43), tenemos

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} \approx \frac{4}{1.13} = 3.52, \quad (3.74)$$

esto quiere decir que la brecha superconductor a temperatura cero es comparable con $k_B T_c$.

3.5. Resultados de BCS

A manera de resumen, se enunciarán brevemente algunos de los principales resultados de la teoría BCS.

- En el caso de interacciones débiles $N(0)V \ll 1$ La teoría predice una transición de fase de segundo orden a una temperatura T_c dada por:

$$K_B T_c \approx \hbar \bar{\omega}_0 e^{-1/N(0)V}$$

- A temperatura cero, tenemos la brecha superconductor dada por

$$\Delta \approx 2\hbar\omega_c e^{-1/N(0)V}$$

- Da un valor aproximado para el cociente de la brecha de

$$\frac{2\Delta}{K_B T_c} \approx 3.52$$

- El calor específico de un superconductor presenta un salto al pasar del estado normal al superconductor. En el caso del modelo BCS, este salto (normalizado respecto de su valor en el estado normal C_n) resulta ser

$$\frac{\Delta C}{C_n} \approx 1.43$$

- Predice la cuantización del flujo magnético capturado por un anillo superconductor en unidades de:

$$\Phi_0 = \frac{hc}{2e}$$

- Es posible recuperar la teoría fenomenológica de Ginzburg-Landau a partir de BCS proponiendo $\Delta = \Delta(\mathbf{r})$ como lo mostró Gor'kov en 1959. Quedando así la teoría fenomenológica de la superconductividad fundamentada de manera microscópica.

Capítulo 4

Modelo de Hubbard

En la mayoría de los superconductores no convencionales la baja dimensionalidad así como la pequeña longitud de coherencia incrementa la interacción *electrón-electrón* por lo que es conveniente tener un modelo basado en interacciones electrónicas locales para describir la formación de pares en estos materiales. El modelo de Hubbard es quizás el modelo más simple que considera interacciones *electrón-electrón* de corto alcance y que permite analizar la correlación electrónica de manera general. A pesar de su simplicidad, solamente se han obtenido soluciones exactas para sistemas de una [LIEB and WU, 1968] e infinitas [METZNER and VOLLHARDT, 1989] dimensiones. El estudio de este modelo se intensificó a partir del descubrimiento de los superconductores de alta T_C [ANDERSON, 1987] donde los pares de Cooper tienen una longitud de coherencia pequeña del orden del parámetro de red [MICNAS *et al.*, 1990]. El modelo original de Hubbard describe interacciones locales entre fermiones [HUBBARD, 1963], con un término cinético y otro término que se refiere a la energía potencial para interacciones locales. En esta sección se revisará el modelo de Hubbard atractivo para una sola banda.

4.1. Hamiltoniano de Hubbard atractivo

El hamiltoniano de Hubbard de una sola banda se puede escribir en el espacio real como

$$H - \mu \hat{N} = t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} , \quad (4.1)$$

donde $\langle i, j \rangle, \sigma$ indica la suma sobre i, j primeros vecinos y el espín σ . El término $\mu \hat{N}$ sirve para fijar el número de partículas, siendo μ el potencial químico y \hat{N} el operador de número.

Utilizando las siguientes relaciones para pasar del espacio real al espacio recíproco[MAHAN, 1990]

$$\begin{aligned} c_{i,\sigma}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma}^+, \\ c_{i,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

tenemos

$$c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma}^+ \sum_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_j} c_{\mathbf{k}',\sigma} \quad (4.3)$$

$$= \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_j} \cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\gamma} c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}',\sigma}, \quad (4.4)$$

donde $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_\gamma + \mathbf{R}_j$, y si además consideramos que \mathbf{R}_γ son los m primeros vecinos de \mathbf{R}_j entonces

$$\sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\gamma} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_j} \right) \cdot \sum_{\gamma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\gamma} c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k}',\sigma}, \quad (4.5)$$

dado que $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{N_s} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i}$ la ecuación anterior queda como

$$\sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \left(\sum_{\gamma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_\gamma} \right) c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (4.6)$$

siguiendo un procedimiento similar al anterior podemos encontrar que

$$\sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma}. \quad (4.7)$$

Utilizando estas dos últimas ecuaciones y comparando el término entre paréntesis de la ecuación (4.6) con la relación de dispersión (2.9) podemos escribir el primer y tercer términos de (4.1) como $\sum_{\mathbf{k},\sigma} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma}$.

4.1 Hamiltoniano de Hubbard atractivo

39

Para reescribir el segundo término del hamiltoniano, utilizamos que $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma}$, mediante (4.2) y renombrar subíndices obtenemos

$$U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} U c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^+ c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\uparrow}, \quad (4.8)$$

Finalmente el hamiltoniano de Hubbard para una banda en el espacio recíproco es

$$H - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} U c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^+ c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^+ c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q},\downarrow} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\uparrow}, \quad (4.9)$$

donde $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ es la relación de dispersión para una partícula y $2\mathbf{q}$ es el momento del centro de masa del par.

Como ya se mencionó anteriormente, en el caso de BCS los términos más relevantes para la superconductividad son aquellos con $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. En este caso para los términos con $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ utilizamos la aproximación de campo medio donde

$$\langle n_{i,\sigma} \rangle = \frac{n}{2}, \quad (4.10)$$

y

$$(n_{i,\sigma} - \langle n_{i,\sigma} \rangle) \cdot (n_{i,\sigma'} - \langle n_{i,\sigma'} \rangle) \approx 0, \quad (4.11)$$

reescribiendo

$$n_{i,\uparrow} = \langle n_{i,\uparrow} \rangle + (n_{i,\uparrow} - \langle n_{i,\uparrow} \rangle) \quad (4.12)$$

$$n_{i,\downarrow} = \langle n_{i,\downarrow} \rangle + (n_{i,\downarrow} - \langle n_{i,\downarrow} \rangle) \quad (4.13)$$

Usando estas relaciones y el hecho de que $\hat{N} = \sum_i n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$

$$U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \approx U \left(\frac{n^2}{4} \sum_i 1 + \frac{n}{2} \sum_i (n_{i,\downarrow} - \frac{n}{2}) + \frac{n}{2} \sum_i (n_{i,\uparrow} - \frac{n}{2}) \right) \quad (4.14)$$

$$= -\frac{Un^2}{4} N_s + \frac{Un}{2} \hat{N}. \quad (4.15)$$

Finalmente reescribimos los términos con $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ de (4.9) como $-Un^2 N_s/4 + Un\hat{N}/2$ para obtener

$$H - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} U c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}',\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow} - \frac{Un^2}{4} N_s \quad (4.16)$$

donde $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + Un/2$ es la relación de dispersión de una partícula incluyendo una auto-energía de $Un/2$. Al comparar el hamiltoniano (4.16) con el hamiltoniano de BCS (3.22) vemos que en el caso de Hubbard $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = U$, es decir, la interacción entre electrones es independiente de su momento $\hbar\mathbf{k}$. Sustituyendo esta interacción en las relaciones (3.70) y (3.71) obtenidas en el desarrollo del formalismo BCS es fácil ver que la única solución posible para la brecha superconductor $\Delta_{\mathbf{k}}$ corresponde a una brecha isotrópica de simetría esférica en el espacio recíproco (Δ). En consecuencia el sistema de ecuaciones integrales acopladas que describen el estado superconductor a temperatura T puede escribirse como

$$1 = \frac{|U|}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2E(\mathbf{k}')} \tanh \left[\frac{E(\mathbf{k}')}{2k_B T} \right], \quad (4.17)$$

$$n - 1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E(\mathbf{k})} \tanh \left[\frac{E(\mathbf{k}')}{2k_B T} \right], \quad (4.18)$$

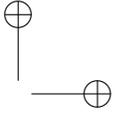
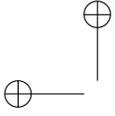
donde $E(\mathbf{k}') = [(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}$. En estas ecuaciones dados T y n se determinan μ y Δ de manera autoconsistente. En particular para determinar la temperatura crítica T_c hacemos $\Delta = 0$, mientras que para determinar la brecha a temperatura cero hay que considerar que $\tanh \left[\frac{E(\mathbf{k}')}{2k_B T} \right] \rightarrow 1$ cuando $T \rightarrow 0$.

4.2. Soluciones Analíticas

Es posible hacer aproximaciones con las cuales las ecuaciones (4.17) y (4.18) tienen solución exacta, como lo es el caso $|U| \gg |t|$. Esta situación puede interpretarse como $|U| \gg |\varepsilon_0(\mathbf{k})|$, significando que la topología de la red se ha vuelto irrelevante. Dentro de esta aproximación obtenemos la siguiente solución al sistema de ecuaciones

$$\mu = -\frac{1}{2}|U|, \quad (4.19)$$

$$\Delta = \frac{1}{2}|U| \sqrt{n(2-n)}, \quad (4.20)$$



4.2 Soluciones Analíticas

41

En la gráfica 4.1 se puede observar una confirmación numérica (círculos abiertos) de esta aproximación (línea sólida) realizada con nuestros códigos. Además, para este mismo caso, es posible calcular a partir de $2E(\mathbf{k}) = 2\sqrt{(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta^2}$ la energía de amarre del par como

$$2\Delta_0 = |U|. \quad (4.21)$$

Para el límite de baja densidad ($n \ll 1$) tenemos

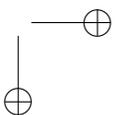
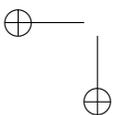
$$\mu = -\frac{1}{2}|U|, \quad \Delta = |U| \sqrt{n/2}. \quad (4.22)$$

Para el caso de la temperatura crítica en el límite cuando $|U| \gg |t|$ a partir de las ecuaciones (5.1) y (5.2) obtenemos

$$\mu = \frac{1}{2}(n-1) \cdot |U|, \quad (4.23)$$

$$k_B T_c = \frac{|n-1| \cdot |U|}{4 \operatorname{arctanh}(|n-1|)}. \quad (4.24)$$

Se puede observar una confirmación numérica de esta aproximación en la figura 4.1.



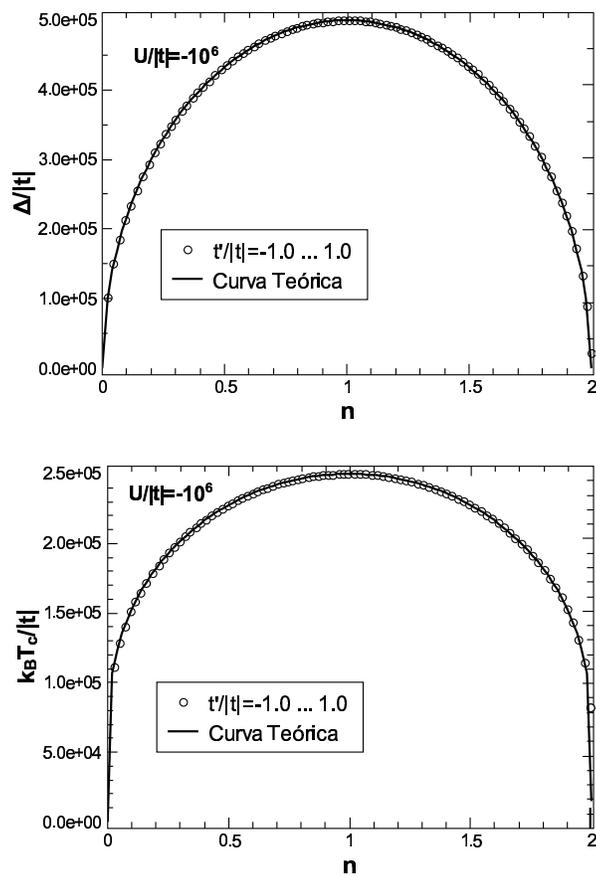


Figura 4.1: (a) $\Delta/|t|$ vs n y (b) $k_B T_c/|t|$ vs n para $U/|t| = -10^6$. En ambas gráficas la línea sólida representa la solución analítica y los círculos abiertos los cálculos numéricos correspondientes.

Capítulo 5

Estado base superconductor en redes triangulares anisotrópicas

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos del estudio numérico del estado superconductor en una red triangular anisotrópica dentro del modelo de Hubbard atractivo para una sola banda. Se han calculado de forma numérica la temperatura crítica (T_c) y la brecha superconductora ($\Delta(T)$) como función de la temperatura variando la topología de la red, el llenado de la banda y la energía de interacción. Se buscaron además configuraciones de estos parámetros que resulten en temperaturas críticas más altas, así como en valores máximos de la brecha superconductora. Asimismo se obtuvo el calor específico como función de la temperatura para algunos sistemas.

Para realizar el estudio numérico de la superconductividad en este sistema, partimos de las ecuaciones que describen el estado superconductor (4.17) y (4.18) y sustituimos la suma sobre \mathbf{k} por una integral sobre la primera zona de Brillouin.

$$1 = -\frac{U}{2} \cdot \frac{1}{2\pi^2 a^2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{\tanh\left(\frac{E(\mathbf{k})}{2k_B T}\right)}{E(\mathbf{k})} dk_x dk_y \quad (5.1)$$

$$n - 1 = -\frac{1}{4\pi^2 a^2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu}{E(\mathbf{k})} \tanh \left[\frac{E(\mathbf{k}')}{2k_B T} \right] dk_x dk_y . \quad (5.2)$$

donde $\varepsilon(\mathbf{k})$ es ahora la relación de dispersión descrita por (2.14). A partir de estas ecuaciones podemos determinar T_c haciendo $\Delta = 0$ así como determinar $\Delta(0)$ haciendo $T \rightarrow 0$, es decir $\tanh \left(\frac{E(\mathbf{k})}{2k_B T} \right) \rightarrow 1$. Cabe mencionar que en todos los cálculos hemos utilizado $t = -1$.

5.1. Brecha superconductor a $T=0$ y Temperatura crítica

En esta sección se presentan los resultados para la temperatura crítica y la brecha superconductor como función de los diferentes parámetros de la red así como también de la energía de interacción U . En la figura 5.1 se muestra el comportamiento de la temperatura crítica como función de U , para una red cuadrada ($t' = 0$) con banda semillena ($n = 1$). Obsérvese el comportamiento lineal de T_c como función de U para $|U| \gg |t|$ así como el crecimiento exponencial para $|U| \gtrsim |t|$. Un comportamiento similar se observa para la brecha superconductor a $T = 0$ ($\Delta(0)$). El comportamiento para $|U| \gg |t|$ se puede obtener de manera analítica a partir de las ecuaciones (4.24) para T_c y (4.20) para $\Delta(0)$.

Los estados con energías de interacción pequeñas, aunque no favorecen la superconductividad, no extinguen el fenómeno, pues para que exista formación de pares en una red bidimensional dentro del modelo de Hubbard no importa que la interacción atractiva sea pequeña siempre y cuando sea distinta de cero [PÉREZ *et al.*, 1996][PÉREZ and WANG, 1998]. Aunque en la gráfica se presenta un caso particular, ayuda a formar una idea de lo que se puede esperar al variar U . Más aún, de las ecuaciones (4.20) y (4.24) se concluye que la topología de la red deja de tener importancia importancia en el límite $|U| \gg |t|$. Aún sabiendo que Δ y T_c en esencia crecerán si aumentamos la energía de interacción, no nos hemos limitado a un único valor de U pues, el comportamiento de las diferentes propiedades del estado superconductor también pueden depender de dicho valor de manera no lineal como se ve en la figura 5.2. En esta figura se presenta la temperatura crítica como función de t' para (a) $U = -1.5|t|$, (b) $U = -2.5|t|$ y (c) $U = -3.5|t|$ para $n = 0.7$ (círculos), para $n = 0.8$ (cuadrados), $n = 0.9$ (rombos), $n = 1$ (triángulos hacia arriba), $n = 1.1$ (triángulos hacia abajo), $n = 1.2$ (triángulos a la derecha) y $n = 1.3$ (triángulos a la izquierda).

5.1 Brecha superconductora a $T=0$ y Temperatura crítica

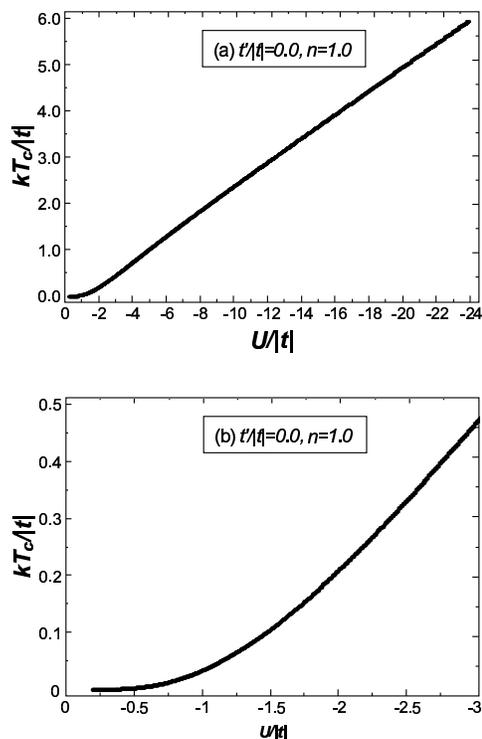
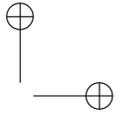
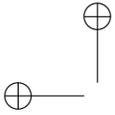


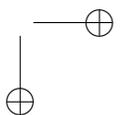
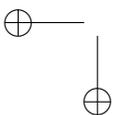
Figura 5.1: (a) Temperatura crítica (T_c) como función de U para una red cuadrada ($t' = 0$) con banda semillena ($n = 1$). (b) Acercamiento a la región $|U/t| \leq 3$ para el mismo sistema que (a).

Nótese que la topología de la red afecta de mayor manera cuando la energía de interacción es más pequeña, y cuanto más crece esta energía, las curvas para diferentes valores de n deberán acercarse a una constante (independientemente de la topología de la red) como lo predice la ecuación (4.24). Por otra parte, obsérvese que si $n < 1$, el máximo de la temperatura crítica para ese llenado se obtiene para $t' > 0$ mientras que si $n > 1$ el máximo de la temperatura crítica se alcanza para $t' < 0$. Más aún, para una interacción dada y pequeña ($|U| \sim |t|$) la mayor temperatura crítica posible se obtiene para $t'/|t|$ cercana a -1 para densidades altas y para $t'/|t|$ cercana a 1 para densidades bajas. En el caso particular de $t' = 0$ (red



46 *Estado base superconductor en redes triangulares anisotrópicas*

cuadrada) la T_c más alta siempre se presenta para una banda semillena ($n = 1$) sin importar el valor de U . En la gráfica 5.2 se puede observar que las curvas son simétricas con respecto a $t' = 0$ y $n = 1$, la forma explícita de esta simetría se verá más adelante.



5.1 Brecha superconductor a $T=0$ y Temperatura crítica

47

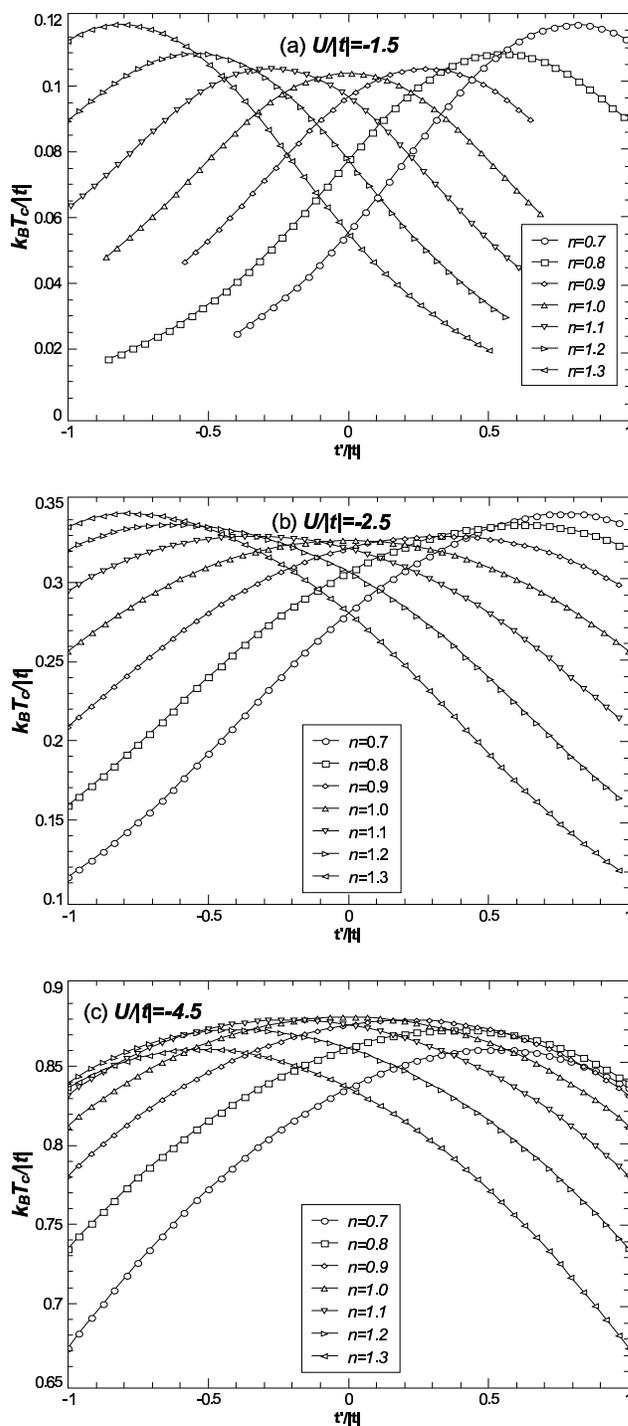


Figura 5.2: Temperatura crítica (T_c) como función de t' para (a) $U = -1.5|t|$, (b) $U = -2.5|t|$ y (c) $U/|t| = -4.5|t|$. Los distintos símbolos denotan distintos llenados de banda (n).

Hasta ahora hemos bosquejado el efecto de la topología de la red sobre la temperatura crítica, pero como ya hemos visto, el estado superconductor depende de manera importante del llenado de la banda (n), por lo que resulta conveniente hacer un estudio más detallado de la dependencia de las propiedades del estado superconductor con de n . Recordemos que $n = 0$ corresponde a una banda vacía y $n = 2$ a una banda completamente llena. En la figura 5.3 se muestra la dependencia de la temperatura crítica como función de n para energías de interacción (a) $U/|t| = -2.5$, (b) $U/|t| = -3.5$ y (c) $U/|t| = -4.5$, y $t' = -1.0|t|$ (círculos), $t' = -0.7|t|$ (cuadrados), $t' = -0.5|t|$ (rombos), $t' = -0.2|t|$ (triángulos hacia arriba), $t' = 0.0|t|$ (triángulos hacia abajo), $t' = 0.2|t|$ (cruz diagonal), $t' = 0.5|t|$ (triángulos a la izquierda), $t' = 0.7|t|$ (triángulos a la derecha) y $t' = 1.0|t|$ (cruz vertical). En la sucesión de gráficas se puede ver que conforme $|U|$ crece, la topología de la red se vuelve menos relevante, y el llenado de banda n donde se alcanza la máxima temperatura crítica se acerca a $n = 1$ tendiendo al caso límite mostrado en la figura 4.1. Asimismo, nótese como a menores energías de interacción ($|U|$), un llenado de banda bajo favorece una T_c más alta en redes con frustración geométrica y $t'/|t| \rightarrow 1$, mientras que un llenado alto la favorece para redes frustradas con $t'/|t| \rightarrow -1$. Más aún, como ya se había mencionado, existe una simetría de las gráficas respecto de $n = 1$. En particular para la red cuadrada ($t' = 0$) cabe destacar su simetría respecto de $n = 1$, donde los estados más desfavorables para la superconductividad son, como era de esperarse, una banda completamente llena y una banda totalmente vacía.

En la figura 5.4 se muestra la dependencia de la brecha superconductor (Δ) como función del llenado de la banda n , para los mismos sistemas que en la figura 5.3. Nótese que el comportamiento es cualitativamente similar al de la temperatura crítica.

5.1 Brecha superconductora a $T=0$ y Temperatura crítica

49

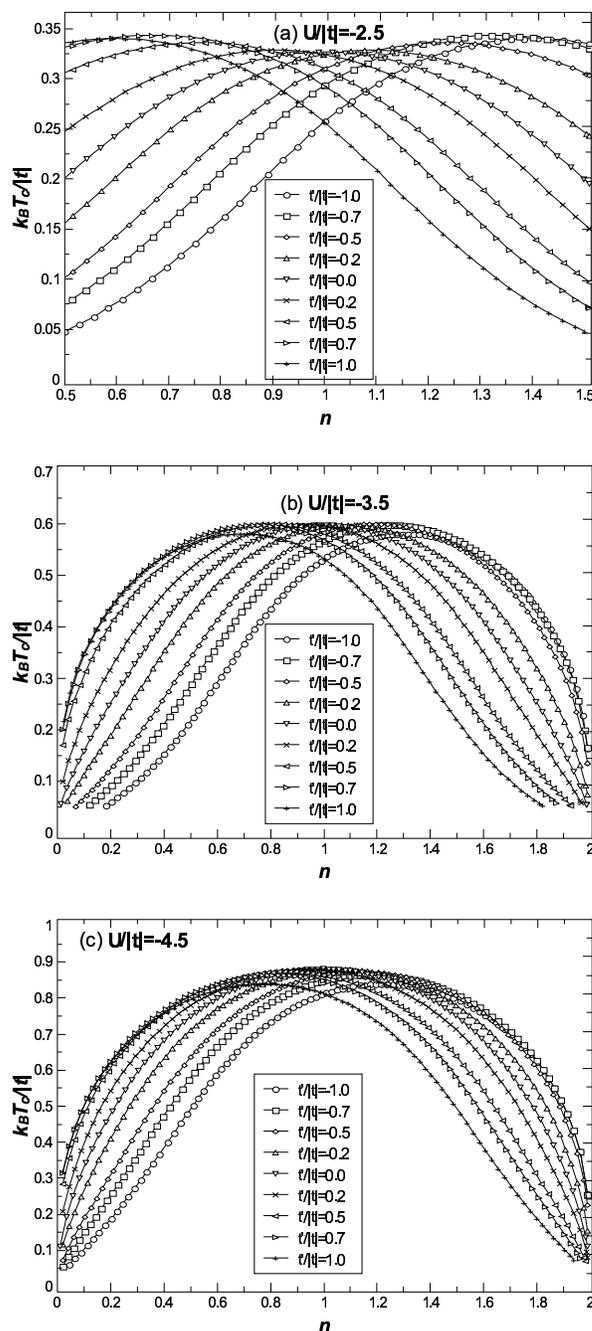


Figura 5.3: Temperatura crítica (T_c) como función de la concentración de electrones (n) para (a) $U/|t| = -2.5$, (b) $U/|t| = -3.5$ y (c) $U/|t| = -4.5$. Los diferentes símbolos corresponden a diferentes valores de t' . Obsérvese como la topología de la red deja de ser relevante conforme $|U|$ crece y los máximos se acercan a $n = 1$.

50 Estado base superconductor en redes triangulares anisotrópicas

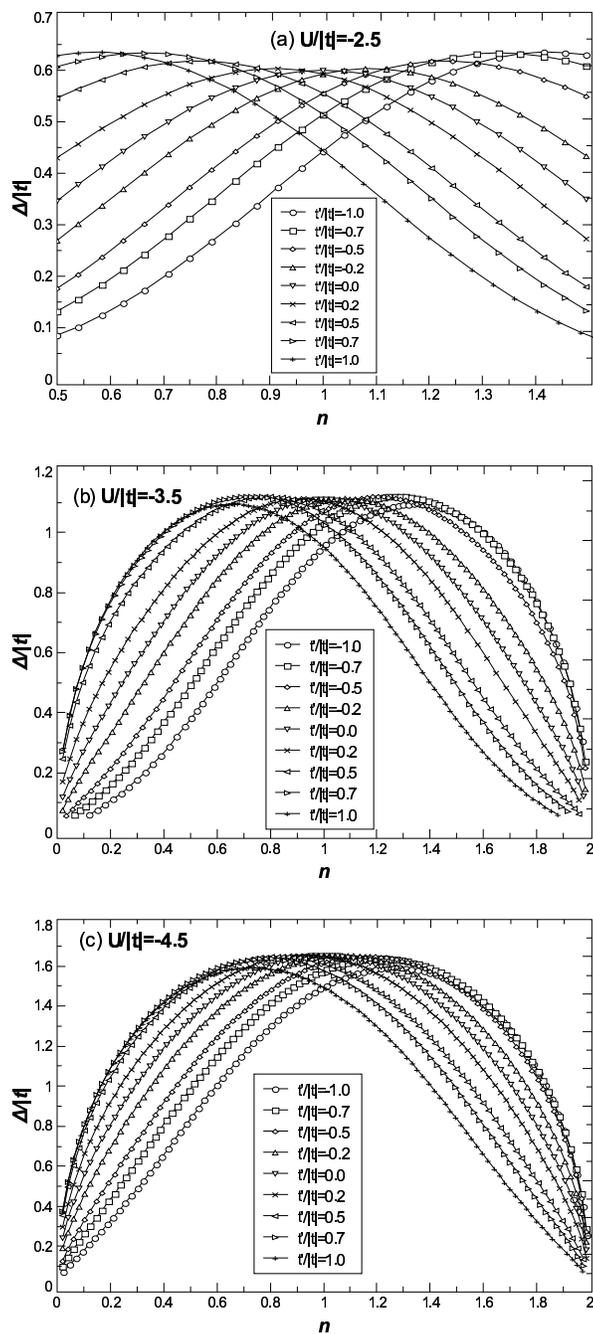


Figura 5.4: Brecha superconductor (Δ) como función de la concentración de electrones (n) para (a) $U/t = -2.5$, (b) $U/t = -3.5$ y (c) $U/t = -4.5$. Los diferentes símbolos corresponden a diferentes valores de t' . Obsérvese como la topología de la red deja de ser relevante conforme $|U|$ crece y los máximos se acercan a $n = 1$.

5.1 Brecha superconductora a $T=0$ y Temperatura crítica

51

En la figura 5.5 se muestra el comportamiento de (a) la brecha superconductora (Δ), (b) la temperatura crítica (T_c) y (c) el cociente de la brecha dado por $\frac{2\Delta}{k_B T_c}$ como función de n para una red cuadrada $t' = 0$ con $U = -3.5|t|$ (columna izquierda) y $U = -4.5|t|$ (columna derecha). Obsérvese que aunque tanto Δ como T_c crecen cuando $|U|$ se incrementa el cociente de la brecha, aunque depende de n , permanece cercano al valor predicho por BCS de 3.5 para un intervalo grande de valores de n .

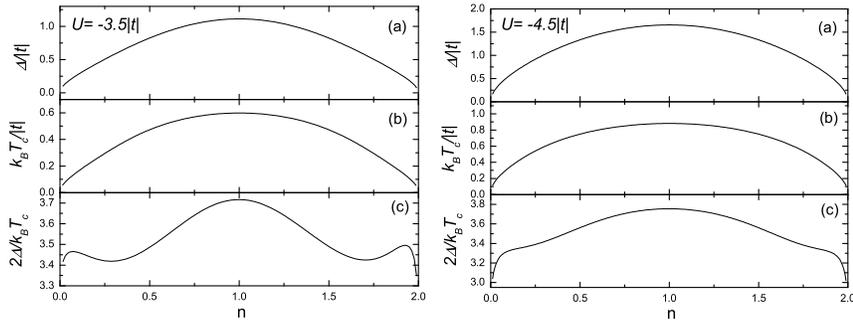


Figura 5.5: (a) Brecha superconductora ($\Delta(0)$), (b) Temperatura crítica (T_c) y (c) Cociente de la brecha $2\Delta(0)/k_B T_c$ como función de n para $t' = 0$

En la figura 5.6 se muestra el comportamiento de (a) la brecha superconductora (Δ), (b) la temperatura crítica (T_c) y (c) el cociente de la brecha dado por $\frac{2\Delta}{k_B T_c}$ como función de n para redes triangulares anisotrópicas con $t' = \pm|t|$, $t' = \pm 0.7|t|$, $t' = \pm 0.5|t|$ y $t' = \pm 0.2|t|$ para una energía de interacción $U = -4.5|t|$.

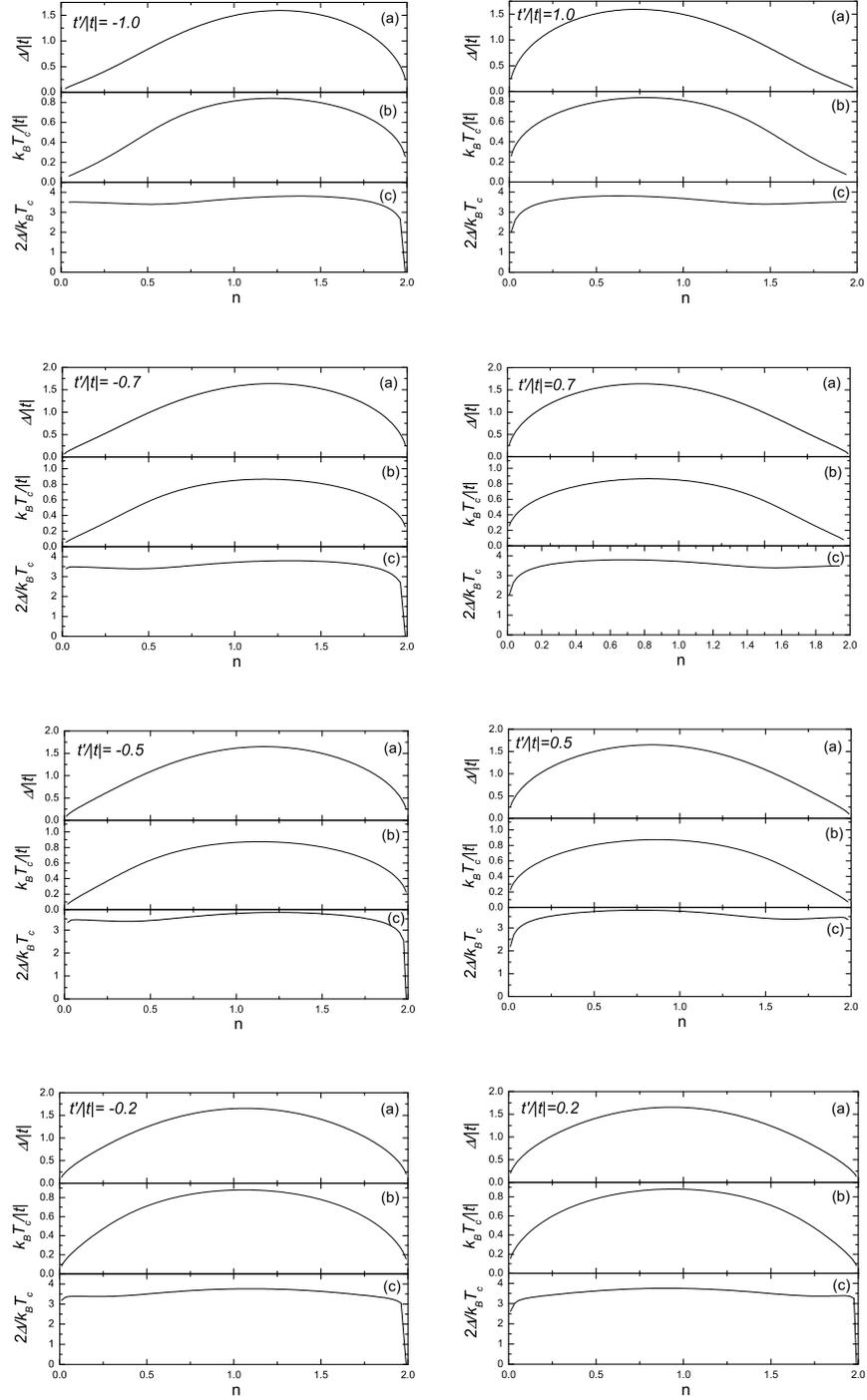


Figura 5.6: Comparación de Δ , T_c y su cociente $2\Delta/k_B T_c$ para distintos valores de $t'/|t|$ a una energía de $U/|t| = -4.5$

5.1 Brecha superconductora a $T=0$ y Temperatura crítica

53

En general, el cociente de la brecha es mayor para $n < 1$ en redes con $t'/|t| \rightarrow 1$, mientras que si $n \rightarrow 2$ entonces el cociente es mayor para redes con $t'/|t| \rightarrow -1$.

Como ya mencionamos, mientras mayor es la frustración geométrica de la red ($|t'/t| \rightarrow 1$) los estados de mayor T_c (Δ) tienden a alejarse de $n = 1$, acercándose a $n = 0$ cuando $t'/|t| \rightarrow 1$ y a $n = 2$ cuando $t'/|t| \rightarrow -1$. Por otra parte, si se observa la densidad de estados de una partícula para diferentes t' (figura 2.3) puede verse que cuando $t'/|t| \rightarrow -1$ la singularidad de van Hove en la que la densidad de estados tiende a infinito se recorre hacia la derecha, lo cual implica que se necesitará un llenado de banda mayor para que el nivel de Fermi esté cerca de dicha singularidad. De la misma forma, si $t'/|t| \rightarrow 1$ dicha singularidad de van Hove se recorre a la izquierda dando como resultado un menor llenado para que el nivel de Fermi coincida con esta singularidad. Esta correlación entre los valores máximos y el llenado cuyo nivel de Fermi coincide con la singularidad de van Hove da pie para observar esto con más detalle.

En la figura 5.7 (5.8) se muestra una comparación entre el llenado de la banda, n^* , cuya energía de Fermi coincide con una singularidad de van Hove que tienda a infinito y el llenado de la banda óptimo, n_{opt} , donde T_c (Δ) alcanza su máximo, como función de t' . Nótese que para $|U|$ pequeño las curvas de $n^*(t')$ y $n_{opt}(t', U)$ son muy parecidas, mientras que conforme $|U|$ aumenta dicha correlación tiende a desaparecer y n_{opt} tiende a un valor constante ($n_{opt} = 1$). Esta correlación para $|U|$ pequeña puede explicarse de la siguiente manera. Como ya se mencionó anteriormente, no importa el origen ni la magnitud de la interacción atractiva entre electrones, pues siempre y cuando ésta sea distinta de cero los electrones añadidos a un mar de Fermi tenderán a formar pares. El proceso de formación de pares continuará hasta que el estado del sistema sea ya muy diferente al del mar de Fermi original. Ahora, si posicionamos el nivel de Fermi de modo que puedan existir muchos estados con energía cercana a la de Fermi (como sucede al colocarla sobre las singularidades de van Hove) se puede formar mayor cantidad de pares sin alterar demasiado el sistema del estado de un mar de Fermi. Además podemos observar que en el modelo BCS la densidad de estados del nivel de Fermi interviene directamente en en la temperatura crítica (3.73) y ésta será mayor mientras mayor sea la densidad de estados. Lo mismo se puede observar también para la brecha superconductora en (3.43). En particular se encontró que debe escogerse aquella singularidad de van Hove infinita que corresponde a un mayor llenado de banda. Para el caso de una red cuadrada ($t' = 0$), a la singularidad de van Hove infinita le corresponde a un llenado de banda $n^*(0) = 1$ lo que explica por qué T_c

(Δ) tiene siempre su máximo a banda semillena. Finalmente en la figura

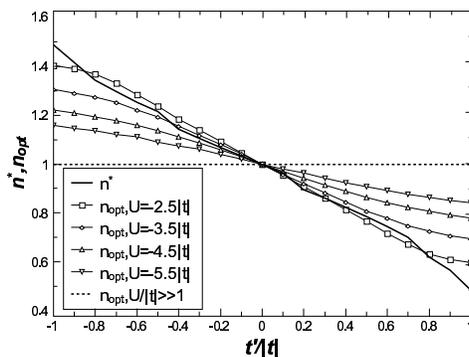


Figura 5.7: n^* (línea sólida) y n_{opt} para T_c (símbolos) como función de t' , esta última para diferentes energías de interacción.

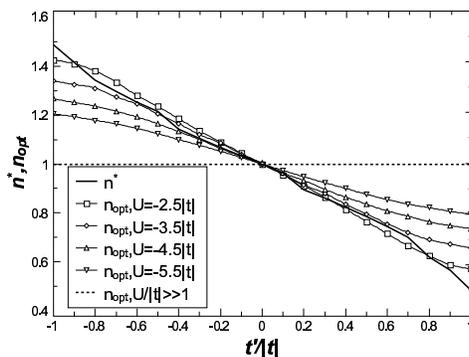


Figura 5.8: n^* (línea sólida) y n_{opt} para Δ (símbolos) como función de t' , esta última para diferentes energías de interacción.

5.9 se muestran los valores máximos de la temperatura crítica (T_c^{max}), la brecha superconductor ($\Delta(0)_{max}$) así como el correspondiente cociente de la brecha ($2\Delta(0)_{max}/k_B T_c^{max}$) como función de t' . Cabe señalar que cada punto no solamente corresponde a una t' diferente, sino también a una n_{opt} diferente dada por las gráficas 5.7 para T_c y 5.8 para $\Delta(0)$. Nótese la simetría de las curvas respecto de $t' = 0$ más aún $n_{opt}(t') = 2 - n_{opt}(-t')$

5.1 Brecha superconductora a $T=0$ y Temperatura crítica

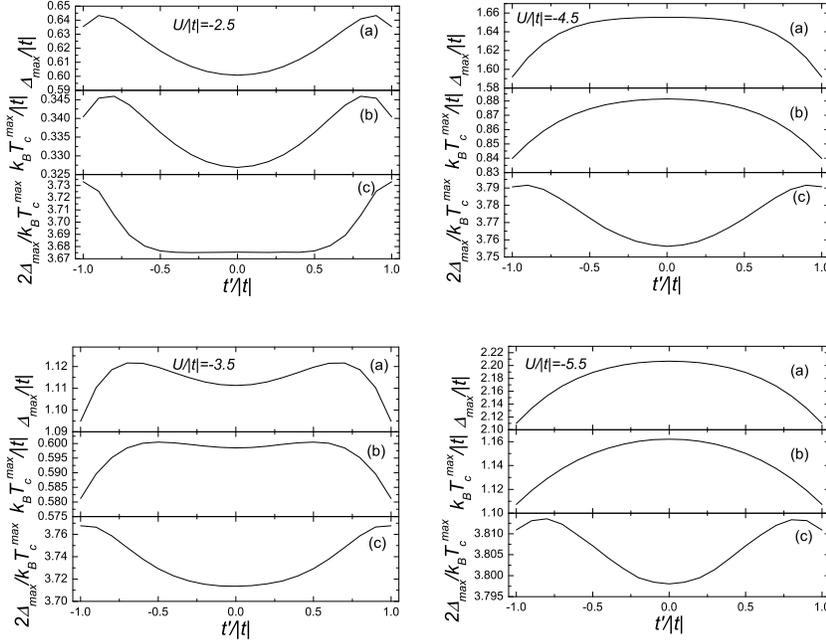


Figura 5.9: Valores máximos de (a) la brecha superconductora ($\Delta(0)_{max}$), (b) la temperatura crítica (T_c^{max}) y (c) el correspondiente cociente de la brecha ($2\Delta(0)_{max}/k_B T_c^{max}$) como función de t' el llenado de la banda n_{opt} correspondiente a cada valor de t' viene dado por las figuras 5.7 y 5.8 para T_c y $\Delta(0)$ respectivamente.

De la observación de las gráficas anteriores, se sugieren las siguientes simetrías para las ecuaciones que describen el estado superconductor para una red triangular anisotrópica en el modelo de Hubbard

$$\begin{aligned}
 \Delta(t', n, U, |t|) &= \Delta(-t', 2 - n, U, |t|) \\
 T_c(t', n, U, |t|) &= T_c(-t', 2 - n, U, |t|) \\
 \mu(t', n, U, |t|) &= U - \mu(-t', 2 - n, U, |t|)
 \end{aligned}
 \tag{5.3}$$

dichas simetrías se pueden corroborar fácilmente sustituyendo en (4.17) y (4.18) utilizando la relación de dispersión correspondiente a la red triangular anisotrópica. El hecho de que sólo haya dependencia de $|t|$ se debe a que

cambiar t por $-t$ es equivalente a tomar la relación de dispersión como $\varepsilon_0(\mathbf{k} + \frac{1}{a}(\pm\pi, \pm\pi))$. Pero como siempre es posible reducir el estudio de esta relación a la primera zona de Brillouin utilizar $\varepsilon_0(\mathbf{k} + \frac{1}{a}(\pm\pi, \pm\pi))$ es completamente equivalente a utilizar $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ pues la red recíproca es cuadrada.

5.2. Brecha superconductor a $T \neq 0$ y Capacidad calorífica electrónica

En general la brecha superconductor, que representa la mínima energía de excitación sobre el estado base superconductor, depende fuertemente de la temperatura, siendo cero a temperatura crítica y siendo máxima a temperatura cero. El modelo BCS predice que la brecha es relativamente constante para temperaturas cercanas a cero y una caída de manera prácticamente vertical cerca de la temperatura crítica [TINKHAM, 2004]. En nuestro caso, usando el modelo de Hubbard, observamos un comportamiento similar. En particular, la figura 5.10 muestra la dependencia de la brecha superconductor respecto de la temperatura para una banda semillena ($n = 1$) y (a) $U/|t| = -3.5$ y (b) $U/|t| = -4.5$ para $t' = -1.0|t|$ (círculos), $t' = -0.7|t|$ (cuadrados), $t' = -0.5|t|$ (rombos), $t' = -0.2|t|$ (triángulos hacia arriba) y $t' = 0.0|t|$ (triángulos hacia abajo). Cabe mencionar que en este caso ($n = 1$) tenemos que $\Delta(T; t') = \Delta(T; -t')$ y ambas gráficas muestran el mismo comportamiento relativo, esto es, las topologías con mayor frustración geométrica presentan valores de T_c y Δ menores que las geometrías con menor frustración (teniendo los valores máximos la red cuadrada). Asimismo, en la figura 5.11 se muestra $\Delta(T)$ en función de T para un llenado de banda $n = 0.7$, $U = -4.5|t|$ y $t' = -1.0|t|$ (círculos), $t' = -0.7|t|$ (cuadrados), $t' = -0.5|t|$ (rombos), $t' = -0.2|t|$ (triángulos hacia arriba), $t' = 0.0|t|$ (triángulos hacia abajo), $t' = 0.2|t|$ (cruz diagonal), $t' = 0.5|t|$ (triángulos a la izquierda), $t' = 0.7|t|$ (triángulos a la derecha) y $t' = 1.0|t|$ (cruz vertical).

5.2 Brecha superconductora a $T \neq 0$ y Capacidad calorífica electrónica 57

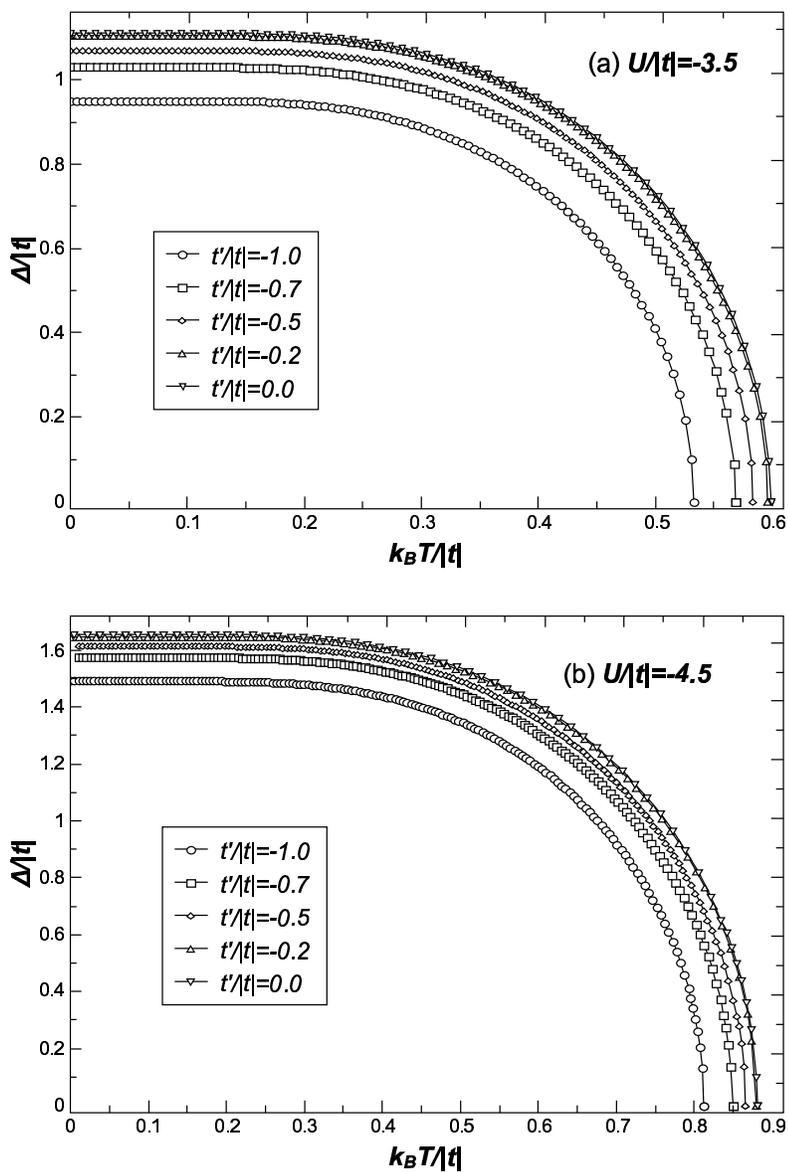


Figura 5.10: Brecha superconductora ($\Delta(T)$) como función de la temperatura (T) para (a) $U/|t| = -3.5$ y (b) $U/|t| = -4.5$

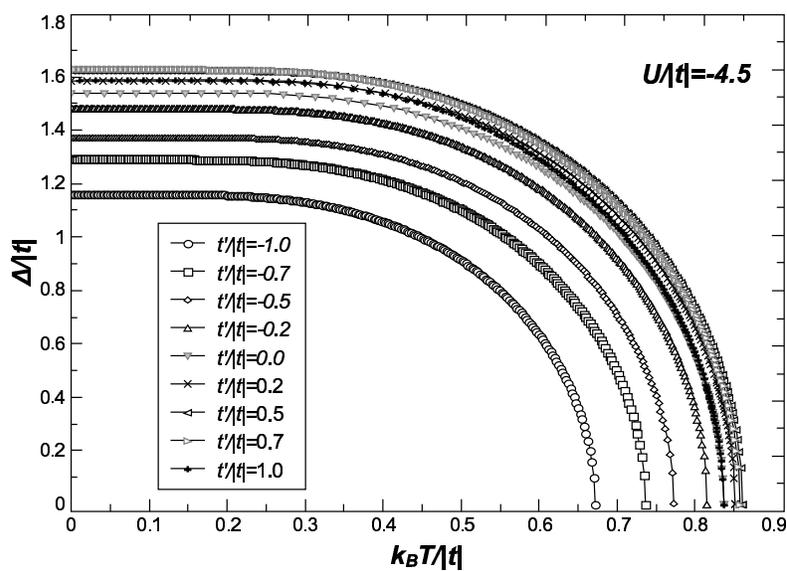


Figura 5.11: Brecha superconductor ($\Delta(T)$) como función de la temperatura (T) para $U/|t| = -4.5$ y $n = 0.7$

5.2 Brecha superconductor a $T \neq 0$ y Capacidad calorífica electrónica 59

Cabe señalar que al graficar la brecha normalizada $(\frac{\Delta(T;t')}{\Delta(0;t')})$ como función de la temperatura normalizada $(\frac{T}{T_c})$ para una n fija, todas las curvas coinciden.

Así como la resistencia eléctrica de un material presenta un salto al pasar de la fase normal a la fase superconductor, el calor específico, una de las características térmicas más importantes de una sustancia, también presenta un salto durante la transición [GINZBURG and ANDRYUSHIN, 2004]. En general, cuando una sustancia es enfriada su calor específico disminuye. En el caso de los superconductores cuando el material es enfriado hasta su fase superconductor, el calor específico electrónico aumenta abruptamente. De hecho la transición superconductor a campo magnético externo igual a cero es una transición de fase de segundo orden o continua [REICHL, 1998].

El calor específico electrónico, es altamente sensible a excitaciones de baja energía, por lo que puede arrojar información acerca de la simetría de los estados superconductores [PÉREZ *et al.*, 2007]. Una vez que conocemos la brecha superconductor como función de la temperatura $\Delta(T)$, conocemos también los valores para las energías excitación $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \Delta(T)^2}$ de las cuasi-partículas. Con estas energías se pueden determinar los números de ocupación fermiónicos $f_{\mathbf{k}} = (1 + e^{\beta E_{\mathbf{k}}})^{-1}$, donde $\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$, para así determinar la entropía como se haría en el caso de un gas de fermiones [TINKHAM, 2004]:

$$S = -2k_B \sum_{\mathbf{k}} [(1 - f_{\mathbf{k}}) \ln(1 - f_{\mathbf{k}}) + f_{\mathbf{k}} \ln f_{\mathbf{k}}] \quad (5.4)$$

El calor específico electrónico se puede escribir de la siguiente manera

$$C = T \frac{dS}{dT} = -\beta \frac{dS}{d\beta} \quad (5.5)$$

sustituyendo (5.4) en (5.5) tenemos

$$C_{es} = 2\beta k_B \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \beta} \ln \frac{f_{\mathbf{k}}}{1 - f_{\mathbf{k}}} = -2\beta^2 k_B \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \beta} \quad (5.6)$$

$$= -2\beta^2 k_B \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \frac{df_{\mathbf{k}}}{d(\beta E_{\mathbf{k}})} \left(E_{\mathbf{k}} + \beta \frac{dE_{\mathbf{k}}}{d\beta} \right) \quad (5.7)$$

$$= 2\beta k_B \sum_{\mathbf{k}} -\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial E_{\mathbf{k}}} \left(E_{\mathbf{k}}^2 + \frac{1}{2}\beta \frac{d\delta^2}{d\beta} \right) \quad (5.8)$$

60 *Estado base superconductor en redes triangulares anisotrópicas*

En particular, en el caso de una red triangular anisotrópica

$$C_{es} = \frac{2k_B}{4\pi^2 a^2 (k_B T)^2} \int \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{1}{e^{E_{\mathbf{k}}} + 1} \left[1 - \frac{1}{e^{E_{\mathbf{k}}} + 1} \right] \left[(E'_{\mathbf{k}})^2 + \frac{E_{\mathbf{k}}}{kT} \frac{dE_{\mathbf{k}}}{d\beta} \right] dk_x dk_y, \quad (5.9)$$

donde

$$\begin{aligned} \frac{dT}{d\beta} &= -\frac{1}{k_B \beta^2}, \\ \frac{dE_{\mathbf{k}}}{d\beta} &= \frac{dE_{\mathbf{k}}}{dT} \cdot \frac{dT}{d\beta}, \\ \frac{dE_{\mathbf{k}}}{dT} &= \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} \left[-[\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu] \frac{d\mu}{dT} + \Delta(T) \frac{d\Delta(T)}{dT} \right], \end{aligned}$$

En las figuras 5.12 y 5.13 se muestran, para energías de interacción $U = -3.5|t|$ y $U = -4.5|t|$ respectivamente, (a) el calor específico electrónico (C) como función de la temperatura para redes triangulares anisotrópicas con una banda semillena, para $t' = -1.0|t|$ (círculos), $t' = -0.7|t|$ (cuadrados), $t' = -0.5|t|$ (rombos), $t' = -0.2|t|$ (triángulos hacia arriba), $t' = 0.0|t|$ (triángulos hacia abajo). En (b) se muestran las correspondientes discontinuidades en el calor específico electrónico normalizadas ($\frac{C_s - C_n}{C_n}$) como función de t' .

La figura 5.14 igualmente muestra (a) el calor específico electrónico (C) como función de la temperatura para las mismas redes triangulares anisotrópicas que la figura 5.13 con un llenado de banda ($n = 0.7$), para $t' = -1.0|t|$ (círculos), $t' = -0.7|t|$ (cuadrados), $t' = -0.5|t|$ (rombos), $t' = -0.2|t|$ (triángulos hacia arriba), $t' = 0.0|t|$ (triángulos hacia abajo), $t' = 0.2|t|$ (cruz diagonal), $t' = 0.5|t|$ (triángulos a la izquierda), $t' = 0.7|t|$ (triángulos a la derecha) y $t' = 1.0|t|$ (cruz vertical). (b) la correspondiente discontinuidad en el calor específico electrónico normalizada ($\frac{C_s - C_n}{C_n}$) como función de t' .

5.2 Brecha superconductora a $T \neq 0$ y Capacidad calorífica electrónica 61

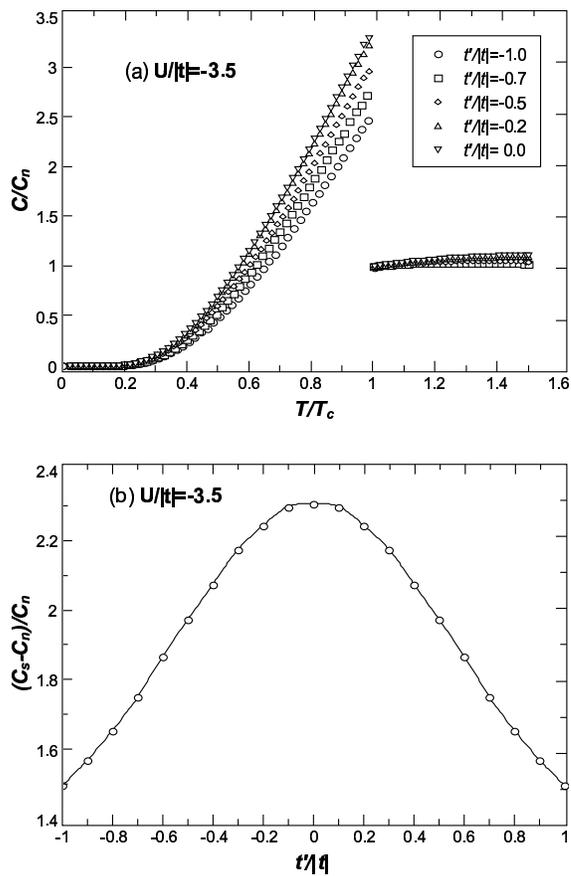


Figura 5.12: (a) Calor específico electrónico como función de la temperatura para diferentes t' y (b) las correspondientes discontinuidades en el calor específico para redes triangulares anisotrópicas con $U = -3.5|t|$.

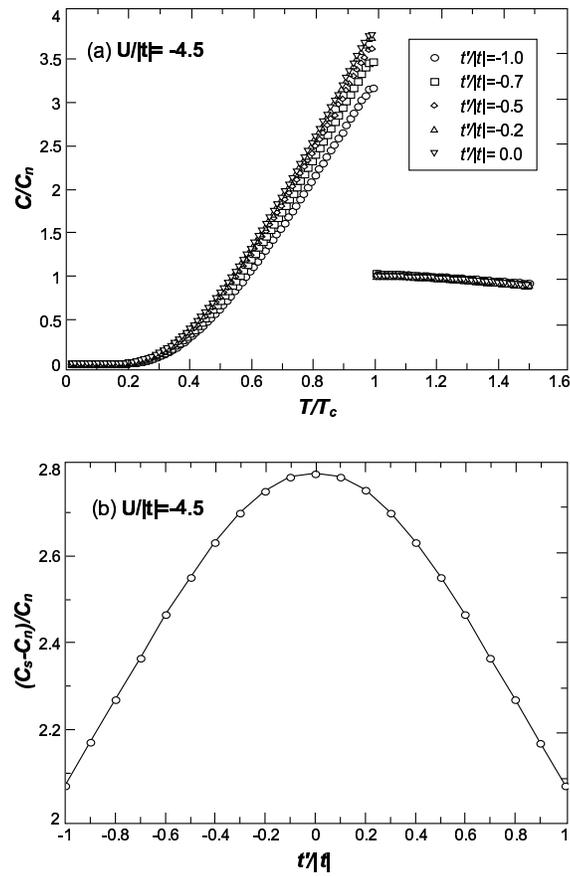


Figura 5.13: (a) Calor específico electrónico como función de la temperatura para diferentes t' y (b) las correspondientes discontinuidades en el calor específico para redes triangulares anisotrópicas con $U = -4.5|t|$.

5.2 Brecha superconductor a $T \neq 0$ y Capacidad calorífica electrónica 63

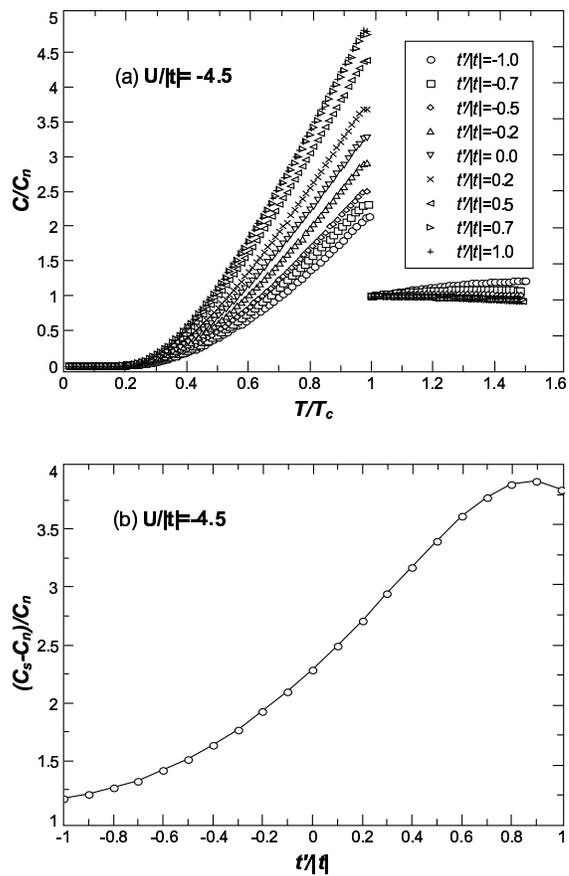
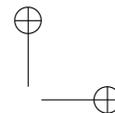
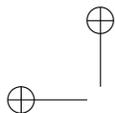
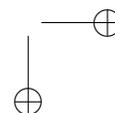
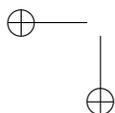


Figura 5.14: (a) Calor específico electrónico como función de la temperatura para diferentes t' y (b) las correspondientes discontinuidades en el calor específico para redes triangulares anisotrópicas con $U = -4.5|t|$ y $n = 0.7$.



64 *Estado base superconductor en redes triangulares anisotrópicas*

En las gráficas de calor específico, se puede observar la misma dependencia relativa entre topologías de red que en el caso de la brecha superconductora. Más aún, obsérvese que la discontinuidad en el calor específico depende fuertemente de t' y alcanza su máximo en aquella t' para la cual el llenado de banda utilizado es el llenado óptimo.



Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis se investigó el problema de la superconductividad en una red triangular anisotrópica por medio del modelo de Hubbard atractivo para una sola banda. Se hizo un estudio de la brecha superconductora, la temperatura crítica, el calor específico y su dependencia de la topología de la red, el llenado de la banda y la energía de interacción. Las principales conclusiones de este estudio son las siguientes

- Se encontró una dependencia no monotónica de la temperatura crítica (T_c) y de la brecha superconductora ($\Delta(0)$) respecto del llenado de la banda.
- Se hallaron las configuraciones de parámetros que favorecen la superconductividad, encontrándose que a energías de interacción débiles, los máximos de la temperatura crítica y de la brecha superconductora se encuentran sobre redes con mayor frustración geométrica, mientras que a interacciones más fuertes la temperatura crítica y la brecha superconductora máximas se encuentran cuando la red es cuadrada.
- Cuando $-|t| < t' < 0$, se encontró que los valores máximos de T_c y $\Delta(0)$ se presentan para llenados de banda (n) mayor que uno ($n > 1$) mientras que para $0 < t' < |t|$ se encuentran para n menor que uno ($n < 1$). En particular para una red cuadrada el llenado óptimo corresponde a una banda semillena ($n = 1$).
- Para una topología dada (t' fija), el llenado óptimo (n_{opt}), es decir el llenado para el cual T_c ($\Delta(0)$) es máxima, coincide con aquel llenado n^* cuya energía de Fermi concuerda con una singularidad de van Hove

infinita de la densidad de estados de una sola partícula correspondiente, si la energía de interacción $|U|$ no es muy grande.

- Por otra parte, conforme $|U|$ aumenta, el llenado óptimo tiende a 1 independientemente de la topología, y en el límite $|U| \rightarrow \infty$ la topología de la red se vuelve irrelevante y $n_{opt} = 1$. Más aún, en este límite tanto $\Delta(0)$ como T_c dependen linealmente de $|U|$.
- El valor del cociente de la brecha $2\Delta(0)/k_B T_c$ cambia de manera no monotónica con n aunque su valor permanece aproximadamente constante alrededor de ~ 3.5 para un intervalo grande de n .
- El comportamiento de $\Delta(T/T_c)/\Delta(0)$ es independiente de la topología.
- La discontinuidad normalizada del calor específico $((C_s - C_n)/C_n)$ depende de la topología de la red y en general son mayores que el predicho por BCS. Para un llenado dado, su valor máximo coincide con la topología de la red para la cual ese llenado es el llenado óptimo.
- Se encontraron algunas simetrías en el modelo de Hubbard para el caso particular de redes triangulares anisotrópicas que relacionan diferentes topología de red y llenados de banda con un mismo valor de T_c y Δ

En este trabajo hemos analizado el efecto de la topología de la red en el estado superconductor a partir de un hamiltoniano de Hubbard con interacciones intrasitio atractivas. A partir de este modelo sólo es posible obtener una brecha superconductoras con simetría esférica, por lo que para obtener brechas superconductoras con otras simetrías es necesario generalizar este modelo para incluir interacciones de salto correlacionado a primeros y segundos vecinos [PÉREZ *et al.*, 2005]. Por esta razón y debido a que los superconductores orgánicos conocidos hasta la fecha pueden presentar simetrías p, d ó f no es posible realizar una comprobación experimental de este modelo. Sin embargo, se espera que el estudio del modelo generalizado aplicado a redes triangulares anisotrópicas, donde la frustración geométrica puede controlarse a través del parámetro de salto a segundos vecinos, resulte en un diagrama de fases del estado base superconductor muy diverso donde puedan encontrarse estados con brechas superconductoras de simetrías s, p, d ó f al variar los parámetros del modelo.

Bibliografía

- [A. SCHILLING, 1993] A. SCHILLING, E. A. (1993). *Nature* **363**, 56.
- [ALEXANDROV and RANNINGER, 1981] ALEXANDROV, A. S. and RANNINGER, J. (1981). *Phys. Rev. B* **23**, 1796.
- [ANDERSON, 1987] ANDERSON, P. (1987). *Science* **235**, 1196.
- [BARDEEN *et al.*, 1957] BARDEEN, J., COOPER, L., and SCHRIEFFER, J. R. (1957). *Phys. Rev.* **106**, 162.
- [CARBOTTE, 1990] CARBOTTE, J. P. (1990). *Rev. Mod. Phys.* **62**, 1027.
- [CHU *et al.*, 1993] CHU, C., GAO, L., CHEN, F., HUANG, Z., MENG, R., and XUE, Y. (1993). *Nature* **365**, 323.
- [COOPER, 1956] COOPER, L. N. (1956). *Phys. Rev.* **104**, 1189.
- [EAGLES, 1969] EAGLES, D. M. (1969). *Phys. Rev.* **186**, 456.
- [ECONOMOU, 1983] ECONOMOU, E.Ñ. (1983). *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer-Verlag Berlin.
- [GINZBURG, 1965] GINZBURG, V. L., . (1965). *Sov. Phys.* **20**, 1549.
- [GINZBURG and ANDRYUSHIN, 2004] GINZBURG, V. L. and ANDRYUSHIN, E. A. (2004). *Superconductivity*. World Scientific.
- [HIRSCH and SCALAPINO, 1985] HIRSCH, J. E. and SCALAPINO, D. J. (1985). *Phys. Rev. B* **32**, 117.
- [HUBBARD, 1963] HUBBARD, J. (1963). *Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238.
- [IBACH and LÜTH, 1991] IBACH, H. and LÜTH, H. (1991). *Solid-State Physics An introduction to Theory and Experiment*. Springer-Verlag.

- [IONOV *et al.*, 1985] IONOV, S. P., IONOVA, G. V., MAIYBAEV, A. I., MANAKOVA, L. A., and SEMIN, G. (1985). *Izv. Akad. Nauk SSSR* **49**, 310.
- [IONOVA *et al.*, 1977] IONOVA, G. V., MAKAROV, E. F., and IONOV, S. P. (1977). *Phys. Status Solidi B* **81**, 971.
- [ISHIDA, 1998] ISHIDA, E. A. (1998). *Nature* **396**, 658.
- [JEROME and SCHULZ, 2002] JEROME, D. and SCHULZ, H. (2002). *Adv. Phys.* **51**, 293.
- [KITTEL, 2005] KITTEL, C. (2005). *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons, Inc, eighth edition.
- [KOMATSU *et al.*, 1996] KOMATSU, T., MATSUKAWA, N., INOUE, T., SAITO, G., *et al.* (1996). *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1340.
- [KONDO and MORIYA, 2004] KONDO, H. and MORIYA, T. (2004). *Journal of the Physical Society of Japan* **73**, 812–814.
- [LIEB and WU, 1968] LIEB, E. and WU, F. (1968). *Lieb, E.H. and Wu, F.Y., Phys. Rev. Lett., 20, 1968, 1445.* **20**, 1445.
- [MACKENZIE, 1998] MACKENZIE, R. H. (1998). *Comments Condens. Matter Phys.* **18**.
- [MAHAN, 1990] MAHAN, G. D. (1990). *Many-Particle Physics*. Plenum Press.
- [MATTHIAS *et al.*, 1954] MATTHIAS *et al.* (1954). *Phys. Rev.* **95**, 1435.
- [MAXWELL, 1950] MAXWELL, E. (1950). *Phys. Rev.* **78**, 477.
- [MCKENZIE, 1997] MCKENZIE (1997). *Science* **278**, 820.
- [METZNER and VOLLHARDT, 1989] METZNER, W. and VOLLHARDT, D. (1989). *Phys. Rev. Lett.* **62**, 324.
- [MICNAS *et al.*, 1987] MICNAS, R., RANNINGER, J., and ROBASZKIEWICZ, S. (1987). *J. Magn. Magn. Mater.* **63-64**, 420.
- [MICNAS *et al.*, 1990] MICNAS, R., RANNINGER, J., and ROBASZKIEWICZ, S. (1990). *Rev. Mod. Phys.* **62**, 113.

Bibliografía

69

- [MOESSNER and RAMIREZ, 2006] MOESSNER, R. and RAMIREZ, A. P. (2006). *Physics Today*.
- [PATHRIA, 1972] PATHRIA, R. (1972). *Statistical Mechanics*. Pergamon Press, London.
- [PUTILIN *et al.*, 1993] PUTILIN *et al.* (1993). *Nature* **362**, 226.
- [PÉREZ, 2002] PÉREZ, L. A. (2002). *Superconductividad con simetría d en el modelo de Hubbard*. Tesis de doctorado, UNAM.
- [PÉREZ *et al.*, 2007] PÉREZ, L. A., MILLÁN, J. S., DOMÍNGUEZ, B. C., and WANG, C. (2007). *J. of Magn. Magn. Mater.* **310**, e129.
- [PÉREZ *et al.*, 2005] PÉREZ, L. A., MILLÁN, J. S., and WANG, C. (2005). *Physica B* **359**, 569.
- [PÉREZ *et al.*, 1996] PÉREZ, L. A., NAVARRO, O., and WANG, C. (1996). *Phys. Rev. B* **53**, 15389.
- [PÉREZ and WANG, 1998] PÉREZ, L. A. and WANG, C. (1998). *Solid State Commun.* **108**, 215.
- [REICHL, 1998] REICHL, L. E. (1998). *A Modern Course in Statistical Physics*. John Wiley and Sons.
- [REYNOLDS *et al.*, 1950] REYNOLDS, C. A. *et al.* (1950). *Phys. Rev.* **78**, 487.
- [SCHRIEFFER and TINKHAM, 1999] SCHRIEFFER, J. and TINKHAM, M. (1999). *Rev. Mod. Phys.* **71**, S313.
- [SHIMIZU *et al.*, 2003] SHIMIZU, Y., MIYAGAWA, K., *et al.* (2003). *Phys. Rev. Lett.* **91**, 107001.
- [SINGLETON and MIELKE, 2002] SINGLETON, J. and MIELKE, C. (2002). *Contemp. Phys.* **43**, 63.
- [SUPERCONDUCTORS.ORG, 2007] SUPERCONDUCTORS.ORG (2007). www.superconductors.org. última revisión enero 2007.
- [TING *et al.*, 1980] TING, C. S., NAGAI, K. L., and WHITE, C. T. (1980). *Phys. Rev.* **B 22**, 2318.
- [TINKHAM, 2004] TINKHAM, M. (2004). *Introduction to Superconductivity*. Dover.

- [TSUEI *et al.*, 1997] TSUEI *et al.* (1997). *Nature* **387**, 481.
- [TSUEI *et al.*, 1994] TSUEI, J. R., KIRTLEY, C. C., CHI, L. S., YU-JAHNES, A., GUPTA, T., SHAW, J. Z., *et al.* (1994). *Phys. Rev. Lett.* **73**, 593.
- [URAYAMA *et al.*, 1988] URAYAMA, H., YAMOCHI, H., SAITO, G., SATO, S., KAWAMOTO, A., TANAKA, J., MORI, H., MARUYAMA, Y., and INOKUCHI, H. (1988). *Chem. Lett.* **1988**, 463.
- [WOLLMAN *et al.*, 1993] WOLLMAN, D. A., VAN HARLINGEN, D. J., LEE, W. C., GINSBERG, D. M., and LEGGETT (1993). *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2134.
- [YANASEA *et al.*, 2003] YANASEA, Y., JUJOB, T., NOMURAC, T., IKEDAD, H., HOTTAE, T., and YAMADADI, K. (2003). *Phys. Rep.* **387**, 1.
- [ZIMAN, 1979] ZIMAN, J. M. (1979). *Models of Disorder*. Cambridge University Press, London.