



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS**

**SUPERCONDUCTIVIDAD ANISOTRÓPICA EN LOS
FORMALISMOS DE BCS GENERALIZADO Y DE
BOGOLIUBOV-DE GENNES**

T E S I S
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

P R E S E N T A:
CÉSAR GABRIEL GALVÁN PEÑA

Director de Tesis
DR. CHUMIN WANG CHEN
Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM

México, D.F., Septiembre 2013



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.

A mis padres:

Irma Marina y José Armando

A mis hermanos:

Luis Armando y Jaime Iván

A:

Mamá Lupe

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer al Dr. Chumin Wang Chen por haber dirigido mi investigación doctoral y por todo el tiempo que dedicó enseñándome a ser un mejor profesionista y sobre todo una mejor persona.

A la Dra. Vicenta Sánchez Morales y al Dr. Raúl Patricio Esquivel Sirvent, miembros del comité tutor, por las valiosas sugerencias realizadas durante la investigación que ayudaron a la culminación de la tesis.

A los integrantes del jurado, Dr. Luis Antonio Pérez López, Dr. Rafael Baquero Parra, Dr. Luis Enrique Sansores Cuevas, Dr. Miguel Cruz Irisson y Dr. Miguel Ángel Solís Atala por el valioso tiempo que dedicaron a la revisión del trabajo escrito así como los comentarios que contribuyeron a mejorar el mismo.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) y a la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA) de la UNAM por el apoyo otorgado a través de los proyectos CONACyT-131596 y UNAM-IN107411 respectivamente.

Al CONACyT por haberme otorgado la beca con la cuál sustenté mis estudios doctorales.

A la Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación (DGTIC) por permitir el acceso a las supercomputadoras Kam Balam y NES donde parte de los cálculos realizados en estas tesis fueron realizados.

Al Ing. Caín González Sánchez y al Ing. Joaquín Morales Rosales por su apoyo en los aspectos técnicos de carácter computacional.

Al personal del Instituto de Investigaciones en Materiales de la UNAM que siempre estuvo dispuesto a ayudarme en todas las necesidades de mi estadía en él.

Finalmente, quiero darles las gracias a mis amigos del cubículo, Carlos Ramírez, Alessio Palavicini, Julio César Hernández y Fernando Salazar por el gran apoyo incondicional que me brindaron en los momentos más difíciles del doctorado, y por hacer de ésta una gran etapa de mi vida.

"La respuesta es amor..."

J.L.G.S.

Resumen

La superconductividad es la ausencia absoluta de resistencia eléctrica mas diamagnetismo perfecto, cuyo descubrimiento fue en 1911 y su primer teoría microscópica se desarrolló hasta cuatro décadas después, ya que es un fenómeno cooperativo fuera del alcance de los modelos de campo medio estándar. Hoy en día, se cree que el fenómeno surge de los pares de Cooper formados por dos electrones o huecos atraídos mediante un bosón. La teoría BCS desarrollada en 1957 introduce una brecha energética superconductoramente esféricamente simétrica debido al intercambio de un fonón virtual durante la formación de pares de Cooper. Sin embargo, los experimentos recientes realizados en cupratos superconductores de altas temperaturas críticas sugieren que los pares de Cooper son formados principalmente por huecos en lugar de electrones con una longitud de coherencia del orden de nanómetros, cuya dinámica se desarrolla en un espacio esencialmente bidimensional, así como la existencia de una brecha anisotrópica de simetría d [Tsuei, 2000]. Uno de los modelos capaces de describir en forma general la correlación electrónica en sólidos y enfatizar su carácter local es el modelo de Hubbard, en el cual la interacción carga-enlace es crucial en la formación de la superconductividad anisotrópica [Pérez, 2010], a pesar de su relativa pequeña intensidad en comparación con la repulsión coulombiana siendo respectivamente 0.1eV y 20.0eV para los orbitales $3d$ [Hubbard, 1963].

Los cupratos superconductores son del tipo II con dos campos magnéticos críticos H_{c1} y H_{c2} entre los cuales el campo magnético penetra al superconductor en forma de vórtices magnéticos cuantizados. El formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG) extiende las ecuaciones de BCS al espacio real permitiendo un análisis detallado de la formación de dichos vórtices. En esta tesis, partiendo de los datos experimentales de la espectroscopía de fotoemisión con resolución angular (ARPES) y de la temperatura crítica, determinamos los parámetros del modelo de Hubbard generalizado. Resolviendo las ecuaciones de BCS con potencial químico dependiente de la concentración de portadores, pudimos reproducir sin parámetros ajustables el calor específico electrónico del compuesto $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ observando una buena concordancia entre la teoría y el experimento. Por otro lado, las soluciones numéricas de las ecuaciones de BdG confirman la existencia de vórtices con flujos magnéticos cuantizados cuyas brechas superconductoras locales dependen de la densidad de portadores de carga. En general, los resultados obtenidos en esta tesis muestran que la superconductividad anisotrópica inducida por la interacción carga-enlace es consistente con lo observado en los cupratos superconductores y los vórtices magnéticos obtenidos en las ecuaciones de BdG dentro del modelo de Hubbard serán el punto de partida tanto para el estudio de la dinámica de vórtices como para el análisis de la superconductividad anisotrópica en presencia de campo magnético.

Abstract

Superconductivity is the complete absence of electrical resistance along with perfect diamagnetism, it was discovered in 1911 and its first microscopic theory developed until four decades later, since it is a cooperative phenomenon beyond the scope of the standard mean-field models. Today, it is believed that the phenomenon arises from the Cooper pairs formed by two electrons or holes attracted by a boson. The BCS theory formulated in 1957 introduces a spherically symmetric superconducting energy gap due to the exchange of a virtual phonon during the formation of Cooper pairs. However, recent experiments made on high critical temperature superconducting cuprates suggest that the Cooper pairs are formed mainly by holes instead of electrons with a coherence length in the order of nanometers, whose dynamics evolve essentially on a two-dimensional space, as well as the existence of an anisotropic gap with d symmetry [Tsuei, 2000]. One of the models capable of describing in general the electronic correlation in solids and emphasize its local character is the Hubbard model, in which the charge-bond interaction is crucial to explain the formation of anisotropic superconductivity [Pérez, 2010], despite its relatively small intensity (~ 0.1 eV) compared to Coulomb repulsion (~ 20.0 eV) in $3d$ orbitals [Hubbard, 1963].

Cuprates are type II superconductors with two critical magnetic fields H_{c1} y H_{c2} , between which the magnetic field penetrates the superconductor in the form of quantized magnetic vortices. The formalism of Bogoliubov-de Gennes (BdG) extends BCS equations to real space enabling a detailed analysis of the formation of such vortices. In this thesis, based on the experimental data of angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) and critical temperature, we determine the parameters of the generalized Hubbard model. Solving the BCS equations with a chemical potential dependent on carrier concentration, we were able to reproduce, without adjustable parameters, the electronic specific heat of the compound $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ observing a good agreement between theory and experiment. Furthermore, numerical solutions of the BdG equations confirm the existence of vortices with quantized magnetic fluxes whose local superconducting gaps depend on the charge carrier density. In general, the results obtained in this thesis show that the anisotropic superconductivity induced by charge-bond interaction is consistent with that observed in superconducting cuprates and the magnetic vortices obtained using BdG equations within Hubbard model provide a starting point for the study of the dynamics of vortices and the analysis of anisotropic superconductivity in the presence of a magnetic field.

Contenido

Introducción	7
Capítulo 1 Teoría Microscópica de la Superconductividad	9
1.1 Teoría de Bardeen-Cooper-Schrieffer	10
1.2 Método de Bogoliubov-de Gennes	18
1.3 Modelo de Hubbard Generalizado	21
Capítulo 2 Superconductividad Anisotrópica	23
2.1 Cerámicos Superconductores	23
2.2 Evidencias Experimentales de la Anisotropía	27
2.3 Espectroscopía de Fotoemisión con Resolución Angular (ARPES)	30
Capítulo 3 Teoría versus Experimento	34
3.1 Ecuaciones de BCS en el Modelo de Hubbard	34
3.2 Determinación de Parámetros a partir de ARPES	36
3.3 Propiedades Termodinámicas	38
Capítulo 4 Superconductividad en Campo Magnético	41
4.1 Propiedades del Estado Mixto	41
4.2 Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes en el Modelo de Hubbard	48
4.3 Brecha Superconductora Local	56
Conclusiones	60
Apéndice A Promedio Térmico de Operadores	61
Apéndice B Aproximación de Campo Medio	64
Bibliografía	68

Introducción

La superconductividad es sin duda uno de los fenómenos más interesantes en la Física, ya que revela el comportamiento cuántico de muchas partículas a escala macroscópica. En los últimos 100 años, desde su descubrimiento en 1911, los trabajos de investigación de dicho fenómeno han sido merecedores del premio Nobel en Física en cinco ocasiones por avances tanto en su entendimiento como en el hallazgo de nuevos efectos y materiales. A pesar del gran esfuerzo de los científicos aún no existe una teoría que explique muchas de las propiedades de los superconductores de altas temperaturas críticas (T_c). En 1957, la teoría microscópica de John Bardeen, Leon N. Cooper y John R. Schrieffer (BCS) mostró que el origen de este fenómeno se debe a un condensado de pares de Cooper, los cuales son pares de electrones formados por una interacción atractiva electrón-electrón mediada por un fonón [Bardeen, 1957]. Un año más tarde, Nikolai Nikolaevich Bogoliubov formuló una teoría alternativa de la superconductividad basada en las transformaciones de Bogoliubov [Bogoliubov, 1958a]. Posteriormente, Pierre Gilles de Gennes extendió dicha teoría alternativa para analizar superconductores inmersos en un campo magnético, llegando a las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes [de Gennes, 1989].

En 1986, se encontró el primer cerámico superconductor con $T_c = 35\text{K}$ mayor que todos los superconductores conocidos hasta entonces [Bednorz, 1986]. Unos meses después, Maw-Kuen Wu de la Universidad de Alabama en Huntsville y Paul Chu de la Universidad de Houston hallaron el compuesto $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ con una $T_c = 93\text{K}$ que supera la temperatura de ebullición del nitrógeno [Wu, 1987]. Estos sucesos motivaron un renovado interés por encontrar superconductores a temperatura ambiente así como examinar el origen de la superconductividad de altas T_c [Anderson, 1987]. Cabe mencionar que en estos cerámicos superconductores, la longitud de coherencia entre pares de Cooper es mucho menor que en los superconductores convencionales [Micnas, 1990]. Una manera general de estudiar la correlación electrónica en sólidos es el modelo de Hubbard, el cual enfatiza la interacción electrón-electrón local [Hubbard, 1963] permitiendo un análisis apropiado de esta corta longitud de coherencia.

En particular, los cupratos cerámicos superconductores tienen las temperaturas críticas más altas entre los superconductores conocidos hasta la fecha. Existen múltiples evidencias experimentales que revelan una brecha superconductora anisotrópica de tipo $d_{x^2-y^2}$ en estos cupratos superconductores de alta T_c , a través de experimentos de interferencia cuántica [Wollman, 1993], estructuras tricristalinas [Tsuei, 2000], espectroscopía de fotoemisión con resolución angular (ARPES) [Damascelli, 2003], entre otros. Desde un enfoque teórico, se ha demostrado que la superconductividad con simetría d es incompatible con el modelo de Hubbard estándar [Su, 1998], mientras que las interacciones de carga-enlace a primeros vecinos (Δ_1) pueden conducir a superconductividad con simetría s anisotrópica [Hirsch, 1989]. En los últimos años, se ha observado que dicha interacción rompe la simetría electrón-hueco, favoreciendo la formación de pares de huecos sin necesidad de una interacción densidad-densidad atractiva. Adicionalmente, la interacción de carga-enlace (Δ_3) a segundos vecinos induce la formación de pares de huecos con simetría $d_{x^2-y^2}$, así como la superconductividad anisotrópica tipo d [Pérez, 2002]. Más aún, una deformación infinitesimal de la estructura cuadrada en los planos de SrO_2

del superconductor Ru_2SrO_4 [Nelson, 2004] puede causar una superconductividad con espín triplete y simetría p [Millán, 2005]. Por otro lado, basado en el formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG) [de Gennes, 1989], se ha estudiado la superconductividad anisotrópica inducida por una interacción densidad-densidad atractiva a primeros vecinos en presencia de campos magnéticos para analizar el estado mixto en los cupratos superconductores [Han, 2010].

En esta tesis, partiendo del modelo de Hubbard generalizado incluyendo las interacciones carga-enlace, estudiamos la superconductividad anisotrópica dentro del formalismo de BCS con potencial químico variable. Los parámetros de dicho modelo se extraen de la espectroscopía de fotoemisión con resolución angular (ARPES) y de la medición de T_c . El calor específico calculado para el compuesto $\text{La}_{x-2}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ sin parámetros ajustables tiene una buena concordancia con los datos experimentales. Para el caso de superconductores sumergidos en campo magnético extendemos nuestro estudio a través del formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG) y presentamos los últimos resultados obtenidos en esta dirección. Esta tesis está organizada de la siguiente manera: en el primer capítulo iniciamos con un resumen de la teoría BCS y del formalismo de BdG, así como del modelo de Hubbard generalizado, los cuales constituyen los fundamentos para el desarrollo de la tesis. En el segundo capítulo hacemos una revisión sobre los cupratos superconductores y las evidencias experimentales de la anisotropía en su brecha superconductora. En particular, se hace una descripción detallada del experimento ARPES. En el capítulo 3 mostramos que el modelo de Hubbard es una herramienta adecuada para el estudio de la superconductividad anisotrópica y que la interacción carga-enlace induce dicha anisotropía a pesar de su pequeña intensidad relativa en comparación con la repulsión coulombiana. Por último, en el Capítulo 4 introducimos el estado mixto de los superconductores tipo II y su descripción usando un modelo combinado del espacio real y el recíproco dentro del formalismo de BdG, el cual nos permite obtener en forma detallada la estructura espacial de los vórtices en dicho estado mixto, confirmando algunos resultados reportados por Q. Han, *et al.* [Han, 2010], así como la variación de su máxima y mínima brecha superconductora con la concentración de portadores de carga para distintas magnitudes del campo magnético.

Capítulo 1 Teoría Microscópica de la Superconductividad

Si tomamos un pedazo de estaño y lo enfiamos hasta llegar a una temperatura crítica $T_c = 3.7\text{K}$, encontramos una anomalía en su calor específico como se muestra en la Fig. 1.1(a). Para temperaturas menores que T_c la muestra se encuentra en un nuevo estado termodinámico, poseyendo una resistencia eléctrica nula y un diamagnetismo perfecto.

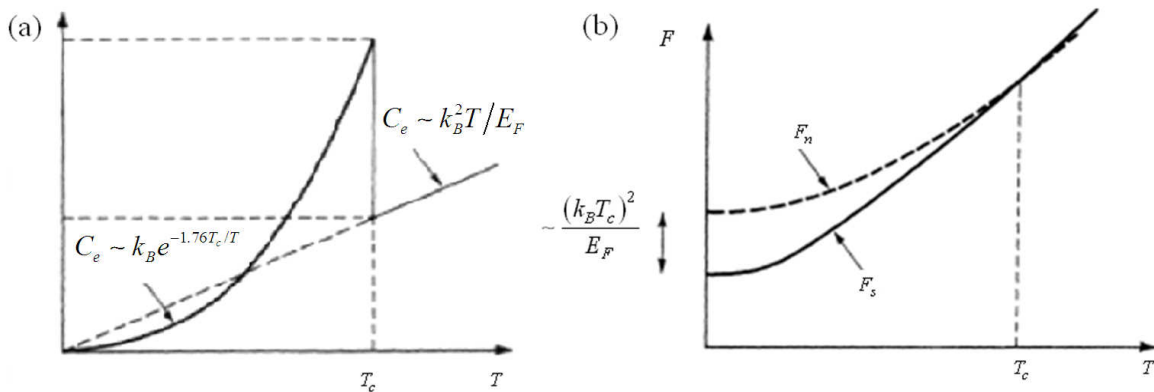


Fig. 1.1 (a) Calor específico y (b) energía libre de Helmholtz de un superconductor convencional como función de la temperatura, donde T_c es la temperatura de transición superconductor.

Cabe mencionar que en la transición al nuevo estado termodinámico no se presenta un cambio estructural. Hoy en día, este nuevo estado se conoce como el estado superconductor. En general, el calor específico es proporcional a la segunda derivada con respecto a la temperatura de la energía libre de Helmholtz ($F = U - TS$) mostrada en la Fig. 1(b), donde la línea continua representa la energía libre del estado superconductor (F_s) y la línea punteada del estado normal (F_n). La diferencia $(F_s - F_n)|_{T=0}$ es la llamada *energía de condensación*.

El primer superconductor fue el mercurio, descubierto por Kammerling Onnes en 1911, con una $T_c = 4.2\text{K}$, sólo tres años después de haber licuado el helio. Después, en 1933, Walther Meissner y Robert Ochsenfeld mostraron experimentalmente que los superconductores sometidos a campos magnéticos expulsan las líneas de campo. Esto es lo que hoy se conoce como *efecto Meissner*. Más tarde, en 1935, los hermanos London partieron de la expresión de la supercorriente $j_s = q_s n_s v_s$ para describir la electrodinámica de los superconductores, siendo respectivamente q_s , n_s y v_s la carga eléctrica, densidad por unidad de volumen y velocidad de los superportadores. De la segunda ley de Newton se tiene que

$$\frac{d\mathbf{j}_s}{dt} = q_s n_s \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = \frac{q_s^2 n_s}{m_s} \boldsymbol{\mathcal{E}}, \quad (1.1)$$

donde m_s es la masa de los superportadores y $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ es el campo eléctrico. Usando la ley de Faraday $\nabla \times \boldsymbol{\mathcal{E}} = -(\partial \mathbf{B} / \partial t) / c$, la ecuación (1.1) se convierte en

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \times \mathbf{j}_s + \frac{q_s^2 n_s}{m_s c} \mathbf{B} \right) = 0. \quad (1.2)$$

Los hermanos London argumentaron que la expresión entre paréntesis en la ecuación (1.2) debe ser cero ya que las soluciones distintas de cero son no físicas, por lo que

$$\nabla \times \mathbf{j}_s = -\frac{c}{4\pi \lambda_L^2} \mathbf{B}, \quad (1.3)$$

donde la longitud de penetración (λ_L) está dada por

$$\lambda_L = \sqrt{\frac{m_s c^2}{4\pi n_s q_s^2}}. \quad (1.4)$$

Usando la ley de Ampere [$\nabla \times \mathbf{B} = 4\pi \mathbf{j}/c$], la ecuación (1.3) conduce a

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda_L^2} \mathbf{B} \Rightarrow B_z(x) = B_0 e^{-x/\lambda_L}, \quad (1.5)$$

para una muestra superconductora rectangular con un campo magnético exterior B_0 en la dirección z . Nótese que λ_L es la longitud típica de decaimiento del campo magnético dentro de la muestra, debido al apantallamiento de una corriente de superportadores.

La teoría de London describe satisfactoriamente las propiedades magnéticas de los superconductores convencionales, es decir, el efecto Meissner. Sin embargo, debido a su naturaleza fenomenológica no explica el origen de la superconductividad. En la década de los cuarentas del siglo pasado, hubo poco avance en la búsqueda de una teoría microscópica mientras se acumulaba una serie de experimentos, tales como la variación exponencial del calor específico [ver Fig. 1(a)], la atenuación ultrasónica y el efecto isotópico, los cuales sugieren la posible existencia de una brecha energética y la participación fonónica en el estado superconductor. En la siguiente sección se describe la teoría microscópica desarrollada por John Bardeen, Leon N. Cooper y John R. Schrieffer.

1.1 Teoría de Bardeen-Cooper-Schrieffer

En 1950 se observó por primera vez el efecto isotópico, mostrando que la temperatura crítica superconductora depende de la masa de los isótopos (M) de la forma $T_c \sim M^{-1/2}$ [Reynolds, 1950], lo cual hizo pensar a los científicos que las vibraciones de red tienen contribuciones importantes en la superconductividad.

• Interacción Electrón-Fonón

En un sólido pueden existir interacciones atractivas entre electrones cuando éstos interactúan a través de un fonón virtual que es el cuanto del movimiento de la red, en contraste de las interacciones repulsivas entre electrones a través de un fotón que es el cuanto del campo electromagnético. El proceso de la atracción puede visualizarse como sigue: un electrón polariza el medio atrayendo iones de carga positiva a su entorno, hecho que puede atraer a un segundo electrón dando como resultado una atracción efectiva entre electrones.

Cuando escribimos funciones de onda para N electrones es conveniente reemplazar el esquema del determinante de Slater de $N \times N$ por el formalismo de segunda cuantización, en el cual los estados cuánticos se describen a través de los operadores de creación ($\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$) y aniquilación ($\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$) para un electrón con vector de onda \mathbf{k} y espín σ . Dado que los electrones obedecen la estadística de Fermi, los operadores de creación y aniquilación son fermiónicos y cumplen las siguientes relaciones de anticonmutación [Landau, 1959]

$$\begin{aligned} \{\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger\} &\equiv \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \\ \{\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}\} &= \{\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger\} = 0. \end{aligned} \quad (1.6)$$

El operador de número se define como

$$\hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} \equiv \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (1.7)$$

cuyo eigenvalor es 1 cuando opera sobre un estado ocupado y 0 cuando opera sobre un estado vacío.

En el lenguaje de segunda cuantización la interacción electrón-fonón puede ser descrita por el hamiltoniano [Frölich, 1950]

$$\hat{H}_{ep} = \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} \left(D_{\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + D_{\mathbf{q}}^* \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \right), \quad (1.8)$$

donde $\hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger$ y $\hat{a}_{\mathbf{q}}$ son respectivamente operadores de creación y aniquilación de un fonón con vector de onda \mathbf{q} y amplitud de probabilidad $D_{\mathbf{q}}$.

Desde el punto de vista cuántico, la interacción electrón-electrón vía fonón puede visualizarse como sigue: un electrón con vector de onda \mathbf{k} emite un fonón virtual con vector de onda $-\mathbf{q}$ el cual es absorbido por un segundo electrón con vector de onda \mathbf{k}' [ver Fig. 1.2(a)]. Por conservación de momento el primer electrón queda con un vector de onda $\mathbf{k}+\mathbf{q}$ y el segundo con $\mathbf{k}'-\mathbf{q}$. Otro posible proceso que tiene el mismo estado inicial y final sería que un electrón \mathbf{k}' emita un fonón \mathbf{q} que sea absorbido por un electrón \mathbf{k} como se muestra en la Fig. 1.2(b).

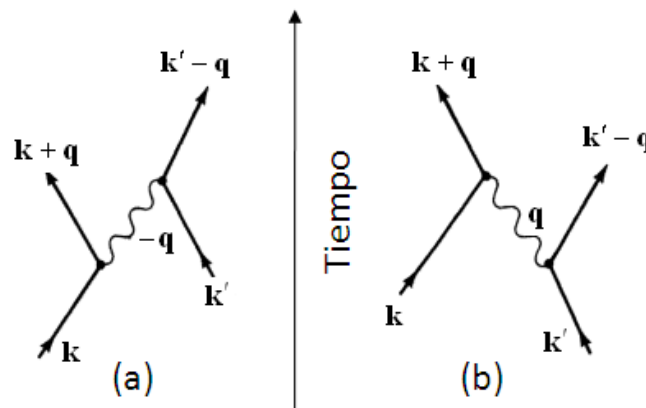


Fig. 1.2 Diagramas de Feynman para la interacción electrón-electrón mediante un fonón. En el proceso (a) el electrón \mathbf{k} emite un fonón con vector de onda $-\mathbf{q}$ el cual es absorbido por el segundo electrón. En el proceso (b) el segundo electrón \mathbf{k}' emite un fonón \mathbf{q} que es absorbido por el primero.

Como se puede ver en la Fig. 1.2 tenemos tres estados en el proceso, inicial $|i\rangle$, intermedio $|m\rangle$ y final $|f\rangle$, que pueden escribirse como

$$|i\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger |0\rangle, \quad (1.9)$$

$$\begin{aligned} |m_1\rangle &= \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{q}}^\dagger |0\rangle \\ |m_2\rangle &= \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (1.10)$$

y

$$|f\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger |0\rangle. \quad (1.11)$$

La energía de transición del estado inicial al final en la teoría de perturbaciones a segundo orden está dada por [Griffiths, 2005]

$$\langle f | \hat{H}_{ep} | i \rangle = \sum_{j=1}^2 \langle f | \hat{H}_{ep} | m_j \rangle \frac{1}{2} \left(\frac{1}{E_f - E_{m_j}} + \frac{1}{E_i - E_{m_j}} \right) \langle m_j | \hat{H}_{ep} | i \rangle, \quad (1.12)$$

donde

$$E_i = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} \quad (1.13)$$

y

$$E_f = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}, \quad (1.14)$$

siendo $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ la energía de un electrón con vector de onda \mathbf{k} . Por ejemplo, para el caso de electrones libres $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$. Por conservación de energía podemos concluir que

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = -(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}). \quad (1.15)$$

La energía de un fonón con vector de onda \mathbf{q} es $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ donde $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{-\mathbf{q}}$ es la frecuencia del mismo. Por lo tanto, la energía de los estados intermedios están dadas por

$$E_{m_1} = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'} + \hbar\omega_{\mathbf{q}} \quad (1.16)$$

y

$$E_{m_2} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}. \quad (1.17)$$

Sustituyendo las ecuaciones (1.13)-(1.17) en la ecuación (1.12) obtenemos

$$\langle f | \hat{H} | i \rangle = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} \frac{|D_{\mathbf{q}}|^2 \hbar\omega_{\mathbf{q}}}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 - (\hbar\omega_{\mathbf{q}})^2} \langle f | \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} | i \rangle, \quad (1.18)$$

por lo que el hamiltoniano que describe la interacción electrón-electrón vía fonón (\hat{H}_{ee}) puede escribirse como

$$\hat{H}_{ee} = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} \\ \sigma, \sigma'}} \frac{|D_{\mathbf{q}}|^2 \hbar\omega_{\mathbf{q}}}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})^2 - (\hbar\omega_{\mathbf{q}})^2} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma'} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}. \quad (1.19)$$

Nótese que para tener una interacción atractiva entre electrones se debe cumplir la siguiente desigualdad

$$|\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}| < |\hbar\omega_{\mathbf{q}}|. \quad (1.20)$$

En general, la desigualdad (1.20) se cumple únicamente cuando $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ se encuentra dentro de una cáscara de espesor $\hbar\omega_D$ por debajo de la energía de Fermi (E_F) a temperatura cero [Bardeen, 1955], donde ω_D es la frecuencia de Debye siendo la máxima que puede tener un fonón dentro del modelo de Debye. La existencia de dicha cáscara se debe a que a temperatura cero todos los estados por debajo de la energía de Fermi están totalmente ocupados, por lo que $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ debe ser mayor que la energía de Fermi mientras que $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ sólo puede estar en la cáscara para satisfacer la desigualdad (1.20). Como resultado de esta interacción atractiva, los estados con energía $E_F < \varepsilon_{\mathbf{k}} < E_F + \hbar\omega_D$ pueden ser parcialmente ocupados a pesar de estar a temperatura cero [Tinkham, 1996].

• Pares de Cooper

En 1956, Leon N. Cooper mostró que en presencia de una interacción atractiva entre dos electrones mediada por fonones, el mar de Fermi es inestable [Cooper, 1956]. Este trabajo fue el inicio de la teoría microscópica de BCS que discutiremos en la sección próxima.

Consideremos un gas de electrones a temperatura cero y un par de electrones adicionales sobre la superficie de Fermi cuyo centro de masa está en reposo. Por el principio de exclusión ellos no pueden ocupar estados con $k < k_F$ y la función de onda del par puede escribirse como

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger |F\rangle, \quad (1.21)$$

donde $|F\rangle$ denota el estado cuántico con todos los estados electrónicos ocupados hasta la energía de Fermi y $g(\mathbf{k})$ es la amplitud de probabilidad de encontrar un par de electrones en los estados \mathbf{k} y $-\mathbf{k}$ con espines \uparrow y \downarrow respectivamente. Los estados con $k < k_F$ ya están ocupados a temperatura cero, es decir,

$$g(\mathbf{k}) = 0 \quad \text{si } k < k_F. \quad (1.22)$$

El hamiltoniano que contiene una interacción electrón-electrón de la forma (1.19) puede escribirse como

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}',\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}, \quad (1.23)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ es la energía de un electrón con vector de onda \mathbf{k} y

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V, & \text{si } E_F < \varepsilon_{\mathbf{k}} \text{ y } \varepsilon_{\mathbf{k}'} < E_F + \hbar\omega_D \\ 0, & \text{otros casos} \end{cases} \quad (1.24)$$

es el potencial de interacción, siendo E_F la energía de Fermi. Utilizando el método variacional se puede demostrar que en el límite de interacción débil $N(0)V \ll 1$ [Tinkham, 1996] la energía del par (1.21) calculada a partir del hamiltoniano (1.23) es

$$E = 2E_F - \frac{2\hbar\omega_D}{e^{2/N(0)V} - 1} \approx 2E_F - 2\hbar\omega_D e^{-2/N(0)V}, \quad (1.25)$$

donde $N(0)$ es la densidad de estados en el nivel de Fermi. De la ecuación (1.25) vemos que existe un estado ligado de dos electrones con energía menor que $2E_F$ debido a la interacción electrón-electrón

atractiva. Como una extrapolación de este resultado, podríamos pensar un posible colapso de la superficie de Fermi, en otras palabras; la existencia de una brecha energética alrededor de la energía de Fermi, hecho confirmado por los experimentos de tunelaje [Giaever, 1974], entre otros.

• Análisis Variacional del Estado Superconductor

Dado que el mar de Fermi podría ser inestable a temperatura cero cuando la interacción entre electrones es atractiva, los electrones se agruparán en pares hasta llegar a un punto de equilibrio, donde la formación de un par adicional ya no disminuye la energía total del sistema. La teoría BCS propone para el estado base superconductor una función de prueba variacional de la siguiente forma [Bardeen, 1957]

$$|\psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle, \quad (1.26)$$

donde $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ son las amplitudes de probabilidad de que el par con vector de onda \mathbf{k} esté desocupado y ocupado, respectivamente, las cuales deben cumplir la siguiente relación

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (1.27)$$

Ahora calcularemos la energía del estado base $|\psi_{BCS}\rangle$ a partir del hamiltoniano (1.23). Como el número de electrones que participan en la formación de pares no es fijo, minimizaremos la siguiente cantidad

$$\langle \psi_{BCS} | \hat{H}_{BCS} - \mu \hat{N} | \psi_{BCS} \rangle, \quad (1.28)$$

donde \hat{N} es el operador de número de electrones y μ es el potencial químico del sistema. De la ecuación (1.23) se tiene que

$$\hat{H}_{BCS} - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad (1.29)$$

donde $\xi_{\mathbf{k}} \equiv \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ es la energía de electrones independientes con respecto al potencial químico. Usando las ecuaciones (1.6) se puede demostrar que [Navarro, 2007]

$$\langle \psi_{BCS} | \hat{H}_{BCS} - \mu \hat{N} | \psi_{BCS} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}. \quad (1.30)$$

Sean

$$u_{\mathbf{k}} \equiv \sin \theta_{\mathbf{k}} \quad \text{y} \quad v_{\mathbf{k}} \equiv \cos \theta_{\mathbf{k}}, \quad (1.31)$$

entonces

$$\langle \psi_{BCS} | \hat{H}_{BCS} - \mu \hat{N} | \psi_{BCS} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \cos^2 \theta_{\mathbf{k}} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}. \quad (1.32)$$

Derivando (1.32) con respecto a $\theta_{\mathbf{k}}$ e igualando a cero, llegamos a la relación

$$\xi_{\mathbf{k}} \tan 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'}. \quad (1.33)$$

Definiendo

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'} = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}. \quad (1.34)$$

y

$$E_{\mathbf{k}} \equiv \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}, \quad (1.35)$$

cuyo significado se discutirá más adelante, encontramos que

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\xi_{\mathbf{k}}}, \quad (1.36)$$

$$2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \sin 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \quad (1.37)$$

y

$$v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2 = \cos 2\theta_{\mathbf{k}} = -\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}. \quad (1.38)$$

Sustituyendo (1.37) en (1.34) llegamos a

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}}. \quad (1.39)$$

Para el caso de un potencial $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ constante dado por la ecuación (1.24), éste puede factorizarse de la suma en la ecuación (1.39) por lo que dicha suma ya no depende de \mathbf{k} , es decir, $\Delta_{\mathbf{k}} \equiv \Delta$ es una constante. Por lo tanto, se tiene que

$$1 = -\frac{V}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} = -\frac{V}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2}}. \quad (1.40)$$

Remplazando la suma de la ecuación (1.40) por una integral de $-\hbar\omega_D$ a $\hbar\omega_D$, es decir,

$$\frac{1}{N(0)V} = \frac{1}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} = \sinh^{-1} \frac{\hbar\omega_D}{\Delta}, \quad (1.41)$$

entonces en el límite de acoplamiento débil, $N(0)V \ll 1$, se tiene que

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh[1/N(0)V]} = \frac{2\hbar\omega_D}{e^{1/N(0)V} - e^{-1/N(0)V}} \approx 2\hbar\omega_D e^{-1/N(0)V}. \quad (1.42)$$

Obsérvese la similitud entre las ecuaciones (1.25) y (1.42), ya que la primera se refiere a la brecha energética de un solo par mientras que la segunda es la brecha de muchos pares, ambas se deben a la interacción electrón-electrón atractiva. Como veremos en la siguiente sección $E_{\mathbf{k}}$ son los elementos de matriz del hamiltoniano en su forma diagonal y el valor mínimo de éstos es Δ que es la brecha superconductor o sea la energía mínima para romper un par a partir de un condensado de pares.

Cabe mencionar que una vez determinada $\Delta_{\mathbf{k}}$ de la ecuación (1.39) se puede calcular la energía del estado superconductor a partir de la ecuación (1.30) obteniendo

$$\langle E \rangle_s = \langle \psi_{BCS} | \hat{H}_{BCS} - \mu \hat{N} | \psi_{BCS} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} - \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E_{\mathbf{k}}} \right). \quad (1.43)$$

Por otro lado, la energía del estado normal en esta misma escala está dada por

$$\langle E \rangle_n = \langle \psi_n | \hat{H}_{BCS} - \mu \hat{N} | \psi_n \rangle = \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} 2\xi_{\mathbf{k}}, \quad (1.44)$$

por lo tanto, la energía de condensación es

$$\langle E \rangle_s - \langle E \rangle_n = \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) + \sum_{|\mathbf{k}| < k_F} \left(-\xi_{\mathbf{k}} - \frac{\xi_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{2E_{\mathbf{k}}}. \quad (1.45)$$

• Transformación de Bogoliubov

La superconductividad a temperaturas finitas se estudiará a continuación. Dado que existe un gran número de pares de Cooper en el estado base $|\psi_{BCS}\rangle$, el operador $\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ tiene un valor de expectación finito $\langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \neq 0$ y las fluctuaciones alrededor de este valor promedio podrían ser pequeñas, es decir,

$$\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle + \left(\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \right), \quad (1.46)$$

donde $\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle$ es dicha fluctuación. Sustituyendo (1.46) en el hamiltoniano (1.29) y despreciando los términos cuadráticos de la fluctuación, obtenemos el hamiltoniano de BCS dentro de la aproximación de campo medio

$$\begin{aligned} \hat{H}_{MF} - \mu \hat{N} = & \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \\ & + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\langle \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \right). \end{aligned} \quad (1.47)$$

Diagonalizaremos este hamiltoniano mediante la transformación de Bogoliubov dada por

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow} & \equiv u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow} & \equiv u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, \end{aligned} \quad (1.48)$$

y sus correspondientes conjugados

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & \equiv u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \\ \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger & \equiv u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}. \end{aligned} \quad (1.49)$$

donde $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger$ y $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}, \sigma}$ son respectivamente operadores de creación y aniquilación que obedecen las reglas de anticonmutación de fermiones [Ec. (1.6)]. Además,

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger | \psi_{BCS} \rangle & = \left(u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\mathbf{k}'} \left(u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle \\ & = \left(u_{\mathbf{k}}^2 \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^2 \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle = 0, \end{aligned} \quad (1.50)$$

y

$$\begin{aligned} \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow} | \psi_{BCS} \rangle & = \left(u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} - v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \right) \prod_{\mathbf{k}'} \left(u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle \\ & = \left(u_{\mathbf{k}}^2 \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^2 \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}'} + v_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \right) | 0 \rangle = 0, \end{aligned} \quad (1.51)$$

es decir, el estado base $|\psi_{BCS}\rangle$ no contiene excitaciones tipo $\hat{\gamma}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$. Para que la transformación sea canónica se debe cumplir la siguiente relación

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1. \quad (1.52)$$

De las ecuaciones (1.48) y (1.49) podemos escribir la transformación inversa como

$$\begin{aligned} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger & \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} &= u_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow} - v_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger &= u_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow} \end{aligned} \quad (1.53)$$

Sustituyendo las ecuaciones (1.53) en el hamiltoniano (1.47) obtenemos

$$\hat{H}_{MF} - \mu\hat{N} = E_0 + \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (1.54)$$

donde

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left[2\xi_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^2 + 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} (1-2f_{\mathbf{k}'}) - u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} (1-2f_{\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} (1-2f_{\mathbf{k}'}) \right], \quad (1.55)$$

es un término constante independiente de los operadores $\hat{\gamma}$,

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left[\xi_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) - 2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} (1-2f_{\mathbf{k}'}) \right] (\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow}), \quad (1.56)$$

es la parte diagonal del hamiltoniano y

$$\hat{H}_1 = \sum_{\mathbf{k}} \left[2\xi_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} (1-2f_{\mathbf{k}'}) \right] (\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow}), \quad (1.57)$$

es la parte no diagonal que contiene el producto de operadores de creación y aniquilación de diferentes estados cuánticos. Para obtener estas ecuaciones hemos usado la siguiente relación [ver Apéndice A]

$$\langle \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle = u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} (1-2f_{\mathbf{k}}), \quad (1.58)$$

donde $f_{\mathbf{k}}$ es la distribución de Fermi-Dirac dada por

$$f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{1 + \exp(E_{\mathbf{k}}/k_B T)}. \quad (1.59)$$

Para que el hamiltoniano (1.54) sea diagonal debemos pedir que

$$2\xi_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} + (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}v_{\mathbf{k}'} (1-2f_{\mathbf{k}'}) = 0. \quad (1.60)$$

Usando las relaciones (1.31), la ecuación (1.60) se convierte en

$$\xi_{\mathbf{k}} \tan 2\theta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'} (1-2f_{\mathbf{k}'}). \quad (1.61)$$

la cual tiene la misma forma que (1.33) excepto por el factor $(1-2f_{\mathbf{k}'})$. Si definimos

$$\Delta_{\mathbf{k}}(T) \equiv -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \sin 2\theta_{\mathbf{k}'} (1-2f_{\mathbf{k}'}) = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} (1-2f_{\mathbf{k}'}) \quad (1.62)$$

y

$$E_{\mathbf{k}}(T) \equiv \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2(T)}, \quad (1.63)$$

mediante el mismo procedimiento de la sección 1.1.3 se obtiene.

$$\Delta_{\mathbf{k}}(T) = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}(T)}{2E_{\mathbf{k}'}(T)} (1-2f_{\mathbf{k}'}). \quad (1.64)$$

De esta manera el hamiltoniano (1.54) toma la forma

$$\hat{H}_{MF} - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \left[\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}(T) + \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2(T)}{2E_{\mathbf{k}}(T)} (1-2f_{\mathbf{k}}) \right] + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}(T) (\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}\downarrow}), \quad (1.65)$$

donde el primer término es una constante independiente de $\hat{\gamma}$ y para el caso $T=0$ se reduce a la ecuación (1.43). En el segundo término, $E_{\mathbf{k}}(T)$ es la energía de excitación de los bogolones [Navarro, 2007] descritas por el operador de número $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\uparrow}$. Así mismo, de la ecuación (1.63) observamos que $\Delta_{\mathbf{k}}(T)$ es la brecha superconductora siendo la mínima energía requerida para romper un par de Cooper. Cabe mencionar que la ecuación (1.64) es la generalización de la ecuación (1.39) para temperatura distinta de cero.

1.2 Método de Bogoliubov-de Gennes

Hasta el momento hemos estudiado un gas homogéneo de electrones en presencia de una interacción atractiva. Ahora abordaremos el caso cuando los electrones también están expuestos a un campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, donde \mathbf{A} es el potencial vectorial de campo electromagnético.

El método usado en la sección 1.1 debe extenderse cuando estamos en presencia de un campo magnético, ya que la función de prueba no tiene suficientes grados de libertad para describir la posible variación espacial de la brecha superconductora. Por este motivo usaremos un método propuesto por Bogoliubov en 1959 [de Gennes, 1989].

• Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes

Dado que el campo magnético rompe la simetría traslacional del sistema nuestras soluciones ahora dependen de la posición. Por este motivo reescribiremos el hamiltoniano antes usado en términos de los operadores de campo ($\hat{\Psi}$) [Landau, 1959]

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) &= \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, \sigma) &= \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \end{aligned} \quad (1.66)$$

los cuales cumplen las relaciones de conmutación para fermiones. Es fácil probar que el hamiltoniano BCS incluyendo campos electromagnéticos toma la forma [Anderson, 1992]

$$\hat{H}_M = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (1.67)$$

donde

$$\hat{H}_0 = \int d\mathbf{r} \sum_{\sigma} \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) \quad (1.68)$$

y

$$\hat{H}_1 = -\frac{1}{2}V \int d\mathbf{r} \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma). \quad (1.69)$$

En la ecuación (1.68) hemos hecho la sustitución de Peierls ($\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}/c$) [Peierls, 1933], la cual será discutida con detalle en el capítulo 4. Para hacer más fácil la manipulación matemática introducimos

$$\hat{H}_0 - \mu\hat{N} = \int d\mathbf{r} \sum_{\sigma} \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{H}_e \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma), \quad (1.70)$$

siendo

$$\hat{H}_e = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m} - \mu. \quad (1.71)$$

Haciendo una aproximación de campo medio tenemos que [Bruus, 2004]

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma') \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) &\approx 2 \sum_{\sigma} \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) \langle \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, -\sigma) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, -\sigma) \rangle \\ &+ 2 \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \downarrow) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle + 2 \langle \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \downarrow) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \uparrow) \end{aligned} \quad (1.72)$$

donde hemos asumido $\langle \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle = 0$ lo cual es correcto si el sistema no es magnético.

Sustituyendo (1.72) en (1.67) obtenemos un hamiltoniano efectivo \hat{H}_{eff} dado por

$$\begin{aligned} \hat{H}_{eff} &= \int d\mathbf{r} \sum_{\sigma} \left[\hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{H}_e \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) + U(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \sigma) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \sigma) \right] \\ &+ \int d\mathbf{r} \left[\Delta(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) + \Delta^*(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \downarrow) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \uparrow) \right], \end{aligned} \quad (1.73)$$

donde

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= -V \langle \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle = -V \langle \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \downarrow) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle \\ \Delta(\mathbf{r}) &= -V \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \downarrow) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle = V \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \uparrow) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \downarrow) \rangle, \end{aligned} \quad (1.74)$$

y como se realiza en el Apéndice A, se puede demostrar que

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, \uparrow) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle &= \sum_{\alpha} \left[|u_{\alpha}(\mathbf{r})|^2 f_{\alpha} + |v_{\alpha}(\mathbf{r})|^2 (1 - f_{\alpha}) \right] \\ \langle \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \downarrow) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, \uparrow) \rangle &= -\sum_{\alpha} u_{\alpha}(\mathbf{r}) v_{\alpha}^*(\mathbf{r}) (1 - f_{\alpha}), \end{aligned} \quad (1.75)$$

siendo

$$f_{\alpha} = \frac{1}{1 + \exp(E_{\alpha}/k_B T)} \quad (1.76)$$

la distribución de Fermi-Dirac.

Con el fin de diagonalizar \hat{H}_{eff} se hace una transformación de Bogoliubov-de Gennes de la forma

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}(\mathbf{r}\uparrow) &= \sum_{\alpha} \left[u_{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha\uparrow} - v_{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha\downarrow}^{\dagger} \right] \\ \hat{\Psi}(\mathbf{r}\downarrow) &= \sum_{\alpha} \left[u_{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha\downarrow} + v_{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\gamma}_{\alpha\uparrow}^{\dagger} \right]\end{aligned}\quad (1.77)$$

con la cual

$$\hat{H}_{eff} = E_g + \sum_{\alpha,\sigma} E_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^{\dagger} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}, \quad (1.78)$$

donde E_g es la energía del estado base para \hat{H}_{eff} y E_{α} es la energía de la excitación α . También podemos escribir la condición (1.78) como

$$\begin{aligned}\left[\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}, \hat{H}_{eff} \right] &= E_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \\ \left[\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^{\dagger}, \hat{H}_{eff} \right] &= -E_{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^{\dagger}\end{aligned}\quad (1.79)$$

Partiendo de las relaciones de anticonmutación fermiónicas de $\hat{\Psi}$, obtenemos los siguientes conmutadores

$$\begin{aligned}\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}\uparrow), \hat{H}_{eff} \right] &= (H_e + U(\mathbf{r})) \hat{\Psi}(\mathbf{r}\uparrow) + \Delta(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}\downarrow) \\ \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}\downarrow), \hat{H}_{eff} \right] &= (H_e + U(\mathbf{r})) \hat{\Psi}(\mathbf{r}\downarrow) - \Delta(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}\uparrow)\end{aligned}\quad (1.80)$$

Ahora, sustituimos (1.77) en (1.80) y aplicamos (1.79). Comparando los coeficientes que multiplican a $\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}$ y $\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^{\dagger}$ en los dos lados de la ecuación (1.80) obtenemos las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes (BdG),

$$\begin{aligned}E_{\alpha} u_{\alpha}(\mathbf{r}) &= (\hat{H}_e + U(\mathbf{r})) u_{\alpha}(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r}) v_{\alpha}(\mathbf{r}) \\ E_{\alpha} v_{\alpha}(\mathbf{r}) &= -(\hat{H}_e^* + U(\mathbf{r})) v_{\alpha}(\mathbf{r}) + \Delta^*(\mathbf{r}) u_{\alpha}(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (1.81)$$

las cuales constituyen una ecuación de eigenvalores

$$\hat{\Omega} \begin{pmatrix} u_{\alpha}(\mathbf{r}) \\ v_{\alpha}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \hat{H}_e + U(\mathbf{r}) & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -\hat{H}_e^* - U(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\alpha}(\mathbf{r}) \\ v_{\alpha}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = E_{\alpha} \begin{pmatrix} u_{\alpha}(\mathbf{r}) \\ v_{\alpha}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (1.82)$$

Se puede demostrar que $\hat{\Omega}$ es un operador hermitiano, por lo que sus eigenfunciones son ortogonales. Además, si $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ es la solución correspondiente al eigenvalor E , $\begin{pmatrix} -v^* \\ u^* \end{pmatrix}$ es la solución asociada al eigenvalor $-E$, ya que la transformación (1.77) es unitaria. Con las ecuaciones de BdG (1.81) obtenemos las energías de excitación del hamiltoniano efectivo de manera auto-consistente con las ecuaciones (1.74), es decir, se propone una solución inicial $\begin{pmatrix} u_{\alpha}(\mathbf{r}) \\ v_{\alpha}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$ y usando las ecuaciones (1.74)

se escriben las ecuaciones de BdG (1.81) que se resuelven para obtener una nueva solución $\begin{pmatrix} u_\alpha(\mathbf{r}) \\ v_\alpha(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$.

Este proceso se repite hasta que la nueva solución coincide con la anterior.

1.3 Modelo de Hubbard Generalizado

El modelo de Hubbard debe su nombre a John Hubbard quien en una serie de artículos introdujo un hamiltoniano para modelar correlaciones electrónicas en sólidos con bandas de energía angostas, como una extensión del modelo de amarre fuerte.

Un sólido puede visualizarse como un conjunto de electrones e iones. Las posiciones de equilibrio de estos últimos forman una red tridimensional. Dentro de la aproximación de Born-Oppenheimer que desacopla la dinámica de electrones del movimiento de los iones [Ashcroft, 1976], el comportamiento de los primeros se puede describir a través del siguiente hamiltoniano en el formalismo de segunda cuantización [Hubbard, 1963]

$$\hat{H}_{HB} = -\sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} (ij|1/r|kl) \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma'} \hat{c}_{k,\sigma'}, \quad (1.83)$$

donde $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$ ($\hat{c}_{i,\sigma}$) es el operador de creación (aniquilación) con espín $\sigma = \uparrow$ ó \downarrow en el sitio i ,

$$t_{i,j} \equiv \langle i | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) | j \rangle = \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (1.84)$$

y

$$\langle ij|1/r|kl \rangle = \iint d^3r d^3r' \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \varphi^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j) \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \varphi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j), \quad (1.85)$$

siendo $V(\mathbf{r})$ es el potencial debido a los iones y $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ es la función de Wannier centrada en el sitio i [Ashcroft, 1976].

Además, Hubbard señaló que las interacciones electrón-electrón dominantes en la ecuación (1.83) para orbitales $3d$ son [Hubbard, 1963]

$$\begin{aligned} U &= \langle ii|1/r|ii \rangle \approx 20 eV \\ V &= \langle ij|1/r|ij \rangle \approx 6 eV \\ \Delta t &= \langle ii|1/r|ij \rangle \approx 0.5 eV \\ \Delta t_3 &= \langle ij|1/r|ik \rangle \approx 0.2 eV \end{aligned} \quad (1.86)$$

donde los sitios j y k son primeros vecinos del sitio i y segundos vecinos entre sí. U y V representan respectivamente la interacción entre dos electrones situados en un mismo sitio y en sitios vecinos; mientras que Δt y Δt_3 son correspondientemente interacciones de carga-enlace, las cuales pueden verse como un término de salto entre primero y segundo vecinos dependiente de la densidad local de otro sitio. Debido a que U es considerablemente mayor que V para orbitales $3d$, el modelo de Hubbard original considera únicamente el término dominante U . Posteriormente, se descubrieron fenómenos que requieren la consideración del término V , como es el caso de las ondas de densidad de carga. El hamiltoniano que contiene términos de interacción U y V se conoce en la literatura como Hubbard

extendido. Hace algunos años, J.E. Hirsch enfatizó la importancia del término Δt en la formación del estado superconductor anisotrópico [Hirsch, 1989]. Recientemente, se ha probado que el término Δt_3 , a pesar de su magnitud relativamente pequeña en comparación con los demás términos de hamiltoniano, provoca la formación del estado superconductor con simetría d en una red cuadrada [Pérez, 2002]. Cabe mencionar que el hamiltoniano que incluye adicionalmente las interacciones carga-enlace, es decir los términos Δt y/o Δt_3 , se denomina Hubbard generalizado. Además, si dicha red presenta una distorsión estructural infinitesimal el estado base del sistema podría ser superconductor con espín triplete y simetría p [Millán, 2005].

En esta tesis estudiaremos la superconductividad anisotrópica usando el formalismo de BCS y la técnica de Bogoliubov-de Gennes, a partir del hamiltoniano de Hubbard generalizado dado por

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t'_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j \\ & + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} (\hat{n}_{i,-\sigma} + \hat{n}_{j,-\sigma}) + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \hat{n}_l \end{aligned} \quad (1.87)$$

donde $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}$ es el operador de número y la ocupación electrónica total en el sitio i es $\hat{n}_i = \hat{n}_{i,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow}$. Los símbolos $\langle i, j \rangle$ y $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ indican que los sitios i y j son primeros y segundos vecinos, respectivamente.

Capítulo 2 Superconductividad Anisotrópica

La teoría BCS publicada en 1957 analiza únicamente la superconductividad isotrópica, es decir, el parámetro de orden superconductor no depende del ángulo. En consecuencia las propiedades superconductoras son independientes del ángulo de medición, si la muestra no presenta una anisotropía estructural. A diferencia de la teoría BCS tradicional, las ecuaciones que describen el estado superconductor desarrolladas en el Capítulo 1 conservan la posible dependencia de la superconductividad con respecto a los ángulos con el fin de poder abordar la superconductividad anisotrópica. En particular, para el caso en el que la interacción electrón-electrón depende explícitamente de la orientación del vector de onda de los electrones, el parámetro de orden superconductor podría ser una función del ángulo dando como resultado una anisotropía en la superconductividad.

Como demuestra la teoría BCS, el estado base superconductor es isotrópico cuando la interacción electrón-electrón atractiva es independiente del ángulo. Sin embargo, dicha interacción en materiales reales no es isotrópica y como consecuencia el estado base podría ser anisotrópico. De manera similar al problema estructural en sólidos, donde en la mayoría de los casos el estado cristalino es el de menor energía. No obstante, bajo ciertas condiciones, estructuras aperiódicas podrían constituir el estado base del sistema. Por ejemplo, en la inestabilidad de Peierls la presencia de una pseudo-brecha alrededor de la energía de Fermi disminuye la energía electrónica del sistema dando lugar a una estructura termodinámicamente estable que podría ser aperiódica.

En este capítulo revisaremos algunos de los hechos experimentales que muestran la brecha superconductoras anisotrópica en los cerámicos superconductores. A partir de dichos resultados aparecieron nuevas teorías que tratan de explicar su comportamiento. Sin embargo, aún no existe consenso en la comunidad sobre el origen de la superconductividad de alta T_c . En particular, los modelos de Hubbard de una y tres bandas podrían ser un punto de partida para la descripción del comportamiento electrónico en estos materiales [Emery, 1987]. Recientemente, se ha aplicado el formalismo de BCS al modelo de Hubbard generalizado para entender las propiedades de los superconductores de alta T_c . Por ejemplo, se ha visto que en la presencia de una interacción carga-enlace a segundos vecinos, el estado base superconductor tiene simetría d [Pérez, 2002].

2.1 Cerámicos Superconductores

En 1986, J.G. Bednorz y K.A. Müller del laboratorio de investigación de IBM en Zurich, encontraron la superconductividad en un material cerámico a una temperatura de 30K [Bednorz, 1986], descubrimiento que fue merecedor del Premio Nobel en 1987. A partir de ese momento, se empezaron a encontrar muchos cerámicos superconductores con T_c cada vez más altas. Actualmente un material hecho a base de mercurio registra la más alta T_c alrededor de 133K a presión atmosférica [Schilling, 1993]. En esta sección se hace un resumen de las propiedades tanto estructurales como electrónicas de los cerámicos superconductores.

- **Estructura y Diagramas de Fase**

En general, los cerámicos superconductores son básicamente tetragonales y todos ellos tienen uno o más planos de CuO_2 en su estructura, los cuales están separados por átomos con radios iónicos grandes, tales como Ba, La, etcétera. Se cree que el fenómeno de la superconductividad ocurre en los planos de CuO_2 y que las otras capas de átomos sirven únicamente para proveer de portadores a estos planos, de ahí que se les conoce con el nombre de *reservorios*. En los planos de CuO_2 , cada ion de cobre está rodeado por cuatro iones de oxígeno a una distancia de 1.9 \AA y cada ion de oxígeno se conecta con dos iones de cobre como se muestra en la Fig. 2.1. Al parecer, existe un número óptimo de planos de CuO_2 para obtener la máxima T_c .

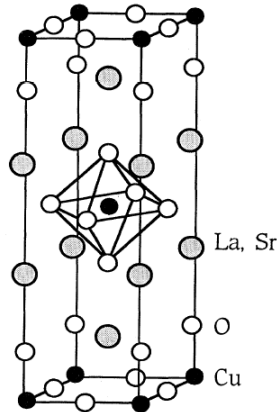


Fig. 2.1 Celda unitaria de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ donde los iones de cobre, oxígeno y lantano (estroncio) son representados por círculos negros, blancos y grises, respectivamente.

Otra propiedad común de estos materiales es la presencia de orden ferromagnético a bajas temperaturas en el régimen no dopado, es decir, cuando no hay portadores libres en los planos. Conforme vamos dopando, se destruye el orden magnético de largo alcance y aparece la fase superconductora.

Un gran número de compuestos de este tipo de materiales han sido sintetizados obteniendo T_c más altas cada vez. En la Tabla 2.1 presentamos los compuestos más relevantes, así como algunos de los superconductores metálicos. Como se puede observar, el Nb_3Ge tenía la T_c más alta conocida antes de 1986.

Tabla 2.1 Temperaturas críticas (T_c) de algunos superconductores

Material	T_c (eV)
$\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$	133
$\text{Tl}_2\text{Ca}_2\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$	125
$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$	92
$\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$	89
$\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$	39
$\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$	24
$\text{RbCs}_2\text{C}_{60}$	33
Nb_3G	23.2
Pb	7.2
UPt_3	0.54

El primer superconductor de alta T_c encontrado fue el $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, el cual tiene una estructura tetragonal centrada en el cuerpo (bct) -nombre que proviene de las posiciones de los cobres- como se muestra en la Fig. 2.1. Los planos de CuO_2 están separados por una distancia de 6.6 \AA y entre ellos hay dos planos de LaO , los cuales forman el reservorio que captura electrones de los planos conductores conforme se va sustituyendo lantano por estroncio. Las configuraciones electrónicas de los elementos que conforman este compuesto son $\text{Cu}:[\text{Ar}](3d)^{10}(4s)$; $\text{La}:[\text{Xe}](5d)(6s)^2$; $\text{O}:[\text{He}](2s)^2(2p)^4$ y $\text{Sr}:[\text{Kr}](5s)^2$. En el cristal, el oxígeno se encuentra en un estado de valencia O^{2-} que completa la capa p .

El lantano pierde tres electrones y se convierte en La^{3+} , el cual está en una configuración estable de capa cerrada. Para conservar la carga eléctrica neutra en la celda unitaria, los átomos de cobre deben encontrarse en un estado Cu^{2+} , el cual se obtiene perdiendo el electrón $4s$ y uno de los electrones $3d$. Esto crea un *hueco* en los orbitales d y entonces Cu^{2+} tiene un espín neto de $\frac{1}{2}$ en el cristal. Cada ion de cobre colinda con dos iones de oxígeno llamados O_z que se encuentran en la dirección z , así como otros cuatro en el plano xy , es decir, los iones de cobre están rodeados por un octaedro de oxígenos como en la perovskita [Ashcroft, 1976]. Sin embargo, la distancia Cu-O_z es de 2.4\AA , la cual es considerablemente mayor que la distancia Cu-O de 1.9\AA en los planos, en consecuencia el enlace Cu-O_z es generalmente más débil que Cu-O en los planos.

El compuesto La_2CuO_4 es un antiferromagneto y a su vez un aislante eléctrico. Conforme los iones de lantano La^{3+} son aleatoriamente reemplazados por Sr^{2+} , menor número de electrones son donados a los planos de CuO_2 , es decir que el compuesto se convierte en un conductor anisotrópico con mayor conductividad eléctrica en el plano xy . En la Fig. 2.2 se muestra el diagrama de fase cuando vamos aumentando la concentración de Sr (x), donde se aprecia la fase superconductor en $x \in [0.05, 0.3]$.

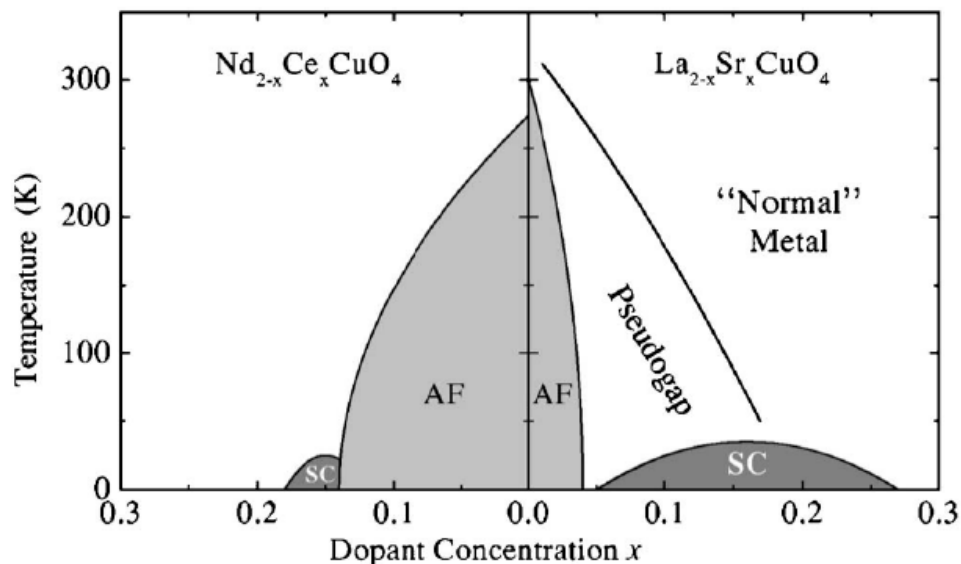


Fig. 2.2 Diagrama de fase de $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ y $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [Damascelli, 2003].

En la Fig. 2.2 se muestra también el diagrama de fase del compuesto $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$, el cual tiene la misma estructura del $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [Dagotto, 1994], con la diferencia en su estructura electrónica ya que $\text{Nd}:[\text{Xe}](4f)^4(6s)^2$ y $\text{Ce}:[\text{Xe}](4f)(5d)(6s)^2$. Cuando los iones de neodimio (Nd^{3+}) son reemplazados por iones de cerio (Ce^{+4}), los planos de CuO_2 obtienen un electrón adicional, en lugar de un hueco como en el $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.

Vemos que ambos diagramas presentan fase antiferromagnética en $x=0$. Cuando x crece la fase superconductor aparece en ambos casos con una óptima composición cerca de $x=0.15$. En la Fig. 2.2 se puede observar que cuando el dopaje es con electrones, la fase antiferromagnética tiene mayor dominio y la superconductividad tiene menor intensidad comparada con la de huecos.

- **Modelos Electrónicos**

Una vez que conocemos la estructura del material el siguiente paso es construir un hamiltoniano que pueda describir el comportamiento de este. Como hemos podido ver, la estructura de los cupratos superconductores es muy compleja y tenemos que hacer algunas aproximaciones. La anisotropía en la conductividad eléctrica de estos materiales sugiere que el transporte electrónico ocurre principalmente en los planos de CuO_2 .

En ausencia de dopaje, los iones de cobre Cu^{2+} tienen nueve electrones en los cinco orbitales d , mientras que el O^{2-} tiene los tres orbitales p ocupados. La degeneración entre los orbitales d se rompe por la estructura de la red, y los orbitales de cobre y oxígeno se separan como se muestra en la Fig. 2.3, donde sólo estamos considerando orbitales p_x y p_y del oxígeno puesto que se estudia únicamente el comportamiento electrónico en el plano [Fulde, 1991].

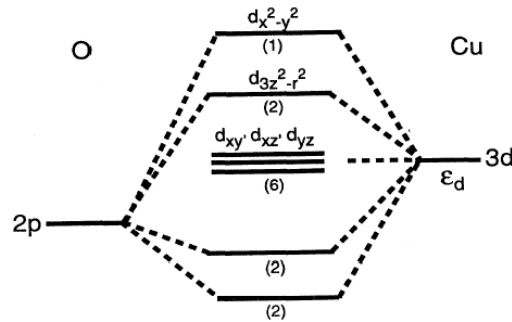


Fig. 2.3 Enlace entre un ion de Cu^{2+} y dos de O^{2-} . Sólo se consideran los orbitales d del Cu y los p_x y p_y de los oxígenos. El número entre paréntesis indica la ocupación de los diferentes niveles cuando $x=0$ [Dagotto, 1994].

El orbital con mayor energía es el de simetría $d_{x^2-y^2}$ y tiene un electrón ausente, es decir un hueco, que da al ion de cobre un espín $1/2$. Entonces, en ausencia de dopaje el material se puede describir con un modelo de espines localizados con lo cual se obtiene el comportamiento magnético espontáneo. Los orbitales de menor energía están ocupados y en una primera aproximación podemos no considerarlos en nuestro hamiltoniano, ya que la superconductividad ocurre a partir de electrones cercanos a la energía de Fermi. Conforme vamos dopando el material quitamos adicionalmente una fracción de electrón por cada cobre. De esta manera el hamiltoniano se puede escribir utilizando únicamente los orbitales p_x y p_y del oxígeno y el orbital $d_{x^2-y^2}$ del cobre obteniendo

$$\hat{H}_{3B} = -t_{pd} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{p}_j^\dagger \hat{d}_i - t_{pp} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{p}_j^\dagger \hat{p}_i + \varepsilon_d \sum_i \hat{n}_i^d + \varepsilon_p \sum_i \hat{n}_i^p + U_d \sum_i \hat{n}_i^d \hat{n}_i^d + U_p \sum_i \hat{n}_i^p \hat{n}_i^p + U_{dp} \sum_i \hat{n}_i^d \hat{n}_i^p, \quad (2.1)$$

donde \hat{p}_j es el operador fermiónico que destruye un electrón en el ion de oxígeno j y \hat{d}_i corresponde al operador de aniquilación en el ion de cobre i . Además sólo incluimos los términos $\langle i,j \rangle$ que se refieren a pares de primeros vecinos siendo i el índice del cobre y j el del oxígeno. El hamiltoniano (2.1) es llamado *modelo de tres bandas*. Dado que la superconductividad es un fenómeno que ocurre cerca del nivel de Fermi, el modelo de tres bandas se puede reducir al *modelo de una banda*, ya que la energía de Fermi se localiza sólo en una de las tres bandas [Zhang, 1988]. En otras palabras, podemos renormalizar las coordenadas de los oxígenos conservando únicamente los sitios de cobre y la presencia

de los oxígenos se incluye dentro de la integral de salto entre los iones de cobre. De esta forma, consideraremos el *modelo de Hubbard de una banda* como el punto de partida a lo largo de toda la tesis. Cabe mencionar que este modelo fue discutido en la sección 1.3. En la Fig. 2.4 se muestra esquemáticamente la estructura de bandas electrónicas de los planos de CuO₂, a diferencia de los niveles de energía del enlace Cu-O en la Fig. 2.3. Nótese que antes de considerar la interacción electrón-electrón en el mismo sitio U se tiene esencialmente dos bandas; una debido a los orbitales p y la otra a los orbitales d . En presencia de dicha interacción U , aparece una brecha energética alrededor de la energía de Fermi debido al ordenamiento antiferromagnético en el plano CuO₂ duplicando la periodicidad del sistema. En consecuencia, la estructura de bandas a la derecha en la Fig. 2.4 tiene menor energía total.

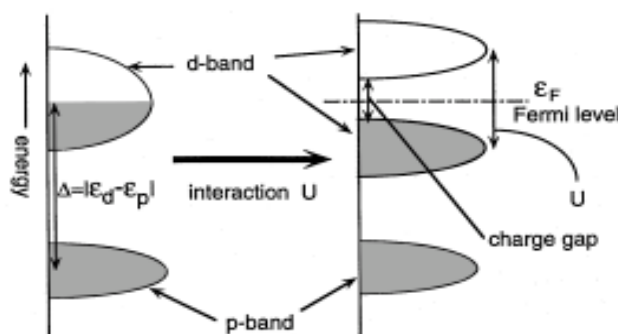


Fig. 2.4 Esquema de bandas electrónicas en los planos de CuO₂ sin y con interacción U [Imada, 1998].

2.2 Evidencias Experimentales de la Anisotropía

A partir de la teoría BCS presentada en el Capítulo 1, obtuvimos que la brecha energética superconductor (Δ_k) cumple con la ecuación (1.39), donde se supone que Δ_k es independiente de \mathbf{k} . Cuando la brecha deja de ser una constante y depende de la orientación del vector de onda \mathbf{k} se dice que la superconductividad es anisotrópica. Como veremos más adelante, la brecha es proporcional a la función de onda de los pares de Cooper, y por lo tanto tiene la misma simetría espacial de dicha función de onda. Las posibles configuraciones para dicha brecha se describen en la Tabla 2.2.

Tabla 2.2 Posibles simetrías de la brecha para estado singulete.

Nombre de la función de onda	s	g	$d_{x^2-y^2}$	d_{xy}
Brecha superconductor Δ_k . El blanco indica positivo y el negro negativo.				

Existen evidencias experimentales de la anisotropía en la brecha de los cupratos superconductores. Dichos experimentos se pueden dividir en dos grupos: los sensibles y los insensibles a la fase. Ambos serán descritos a continuación.

• Experimentos Insensibles a la Fase

Entre los experimentos insensibles a la fase se encuentran las mediciones de la longitud de penetración [Hardy, 1994] y del calor específico [Moler, 1997], así como la espectroscopía de fotoemisión con resolución angular [Damascelli, 2003], la dispersión Raman [Devereaux, 1995] y la resonancia magnética nuclear [Martindale, 1993], los cuales han mostrado evidencia de que el apareamiento electrónico en los cupratos superconductores es anisotrópico.

El más directo de estos experimentos para observar la existencia de líneas nodales es quizás la espectroscopía de fotoemisión con resolución angular (ARPES), la cual consiste en hacer incidir un haz de fotones sobre una muestra superconductora arrancando electrones por efecto fotoeléctrico. Un detector, colocado en el mismo plano de incidencia del haz, cuenta el número de electrones y mide el momento con el que llegan, de esta manera, por conservación de la energía se puede tener información de los electrones cuando aún no han salido de la muestra. Esta técnica puede emplearse para investigar la variación de la brecha respecto al ángulo.

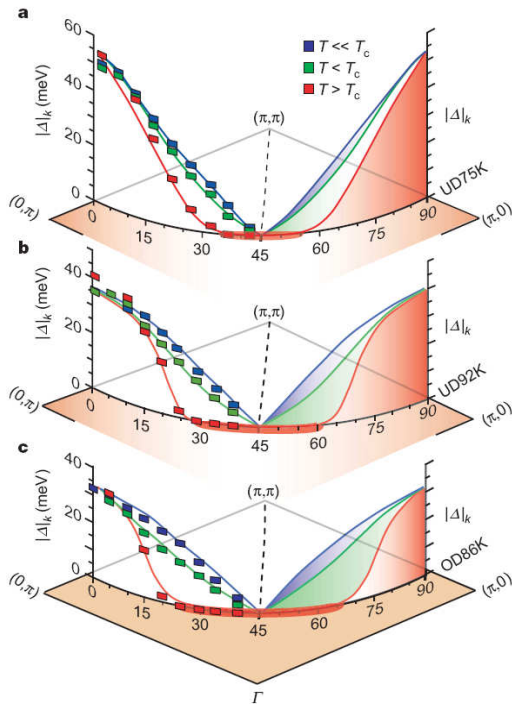


Fig. 2.7 Evolución de la brecha superconductora para tres diferentes niveles de dopaje. a) Muestra subdopada con $T_c = 75$ K. b) Muestra subdopada con $T_c = 92$ K. c) Muestra Sobredopada con $T_c = 86$ K. Las líneas roja, verde y azul se refieren respectivamente a temperaturas mayores, menores y mucho menores que T_c [Lee, 2007].

Recientemente se ha encontrado que la brecha en $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ [Campuzano, 2010] tiene un valor finito a lo largo de la dirección Γ -M y es casi cero a lo largo de Γ -Y [Lee, 2007], lo cual es consistente con la superconductividad $d_{x^2-y^2}$.

En la Fig. 2.7 se muestra la evolución de la brecha con respecto a la temperatura, en tres muestras con diferentes niveles de dopaje. A $T \ll T_c$ la brecha superconductora tiene la forma de simetría $d_{x^2-y^2}$ como se ve en las líneas azules. A temperatura cercana a T_c dicha brecha se desvía de la forma $d_{x^2-y^2}$ como lo muestran las curvas verdes. A temperaturas mayores que T_c aún existe una brecha cerca de la región antinodal, representada por las curvas rojas. Conforme aumenta el dopaje esta región disminuye.

Sin embargo, estos experimentos no pueden distinguir entre un superconductor con simetría d y uno con simetría s anisotrópica. En la siguiente sección se discutirán algunos experimentos que pueden

observar el cambio de fase en la brecha superconductora, lo cual sugiere fuertemente la existencia de una simetría del tipo $d_{x^2-y^2}$.

• **Experimentos Sensibles a la Fase**

Si en un superconductor con forma de anillo fluye una corriente persistente, existe un flujo de campo magnético constante a través del mismo, el cual toma valores que son múltiplos enteros del cuanto de flujo magnético ($\Phi_0 \equiv hc/2e = 2 \times 10^{-7} \text{ Gauss} \cdot \text{cm}^2$). El efecto Josephson de corriente directa consiste en que una corriente (I_s) puede fluir a través de una unión de dos superconductores separados por una delgada capa de un material normal, sin ningún voltaje aplicado. Esta corriente está determinada por la diferencia de fase ($\Delta\varphi$) de la función de onda en cada superconductor, como se ve en la ecuación (2.2)

$$I_s = I_c \sin \Delta\varphi, \tag{2.2}$$

donde I_c es la corriente máxima que la unión Josephson puede mantener. Dicha corriente se debe al tunelaje de pares de Cooper a través de la barrera de potencial en el material normal [Josephson, 1962]. En un circuito formado por junturas Josephson las corrientes superconductoras interfieren y esta interferencia se puede modular mediante un campo magnético externo. Basados en la ecuación (2.2) se puede obtener información de la fase en los cupratos superconductores. En un primer intento experimental, un cuprato superconductor cristalino se conecta a un superconductor convencional tipo s como se ve en la Fig. 2.8, de tal forma que se compara la fase en la dirección x con aquella de la dirección y del cuprato, encontrándose una diferencia de fase de π [Wollman, 1993].

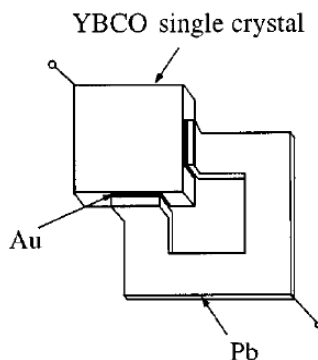


Fig. 2.8 Junta Josephson del cuprato superconductor YBCO con el superconductor convencional Pb.

Basado en una idea similar, se hicieron crecer litográficamente anillos superconductores en películas delgadas que contienen dos o tres junturas Josephson entre las películas superconductoras con un alineamiento cristalino bien definido. Para este fin se usaron substratos tricristalinos de SrTiO_3 . Sobre este substrato se depositaron películas delgadas de cupratos superconductores formando un anillo interrumpido por tres fronteras de grano que hacen las veces de junturas Josephson como se muestra en la Fig. 2.9. Una corriente espontánea fluye alrededor del anillo aún en la ausencia de un campo magnético aplicado [Tsuei, 2000]. El flujo magnético creado por esta corriente es la mitad de un flujo asociado con un vórtice ordinario. Este es el resultado esperado para un material cuya brecha superconductora tiene simetría $d_{x^2-y^2}$.

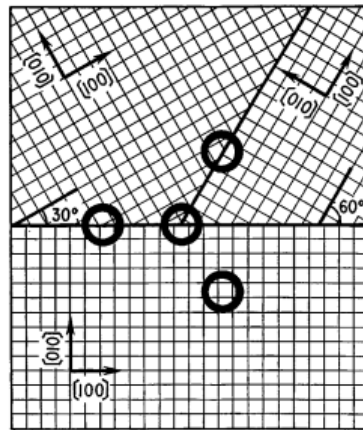


Fig. 2.9 Experimento de tres juntas Josephson con direcciones cristalinas indicadas en la figura. Los círculos representan anillos de corriente.

2.3 Espectroscopía de Fotoemisión con Resolución Angular (ARPES)

Cuando incide luz en una muestra, un electrón puede absorber un fotón y escapar del material con una energía cinética máxima $h\nu - \phi$, donde ν es la frecuencia del fotón y ϕ es la función de trabajo de la muestra, es decir, la energía mínima necesaria para arrancar un electrón de un sólido. Este fenómeno se conoce como efecto fotoeléctrico y fue explicado por Albert Einstein en 1905 haciéndose merecedor del premio Nobel. De hecho, el efecto fotoeléctrico es la esencia de los experimentos de fotoemisión con resolución angular.

• Descripción General

Cuando se realiza la espectroscopía de fotoemisión con resolución angular (ARPES), un haz de radiación monocromático incide sobre una muestra y como resultado los electrones son emitidos por efecto fotoeléctrico escapando al vacío en todas direcciones. Se recolectan dichos electrones mediante un detector, midiendo la energía cinética E_{kin} de los mismos para un ángulo de emisión dado, como se muestra en la Fig. 2.10, donde la presencia de un campo magnético dentro del detector separa los electrones con diferentes E_{kin} .

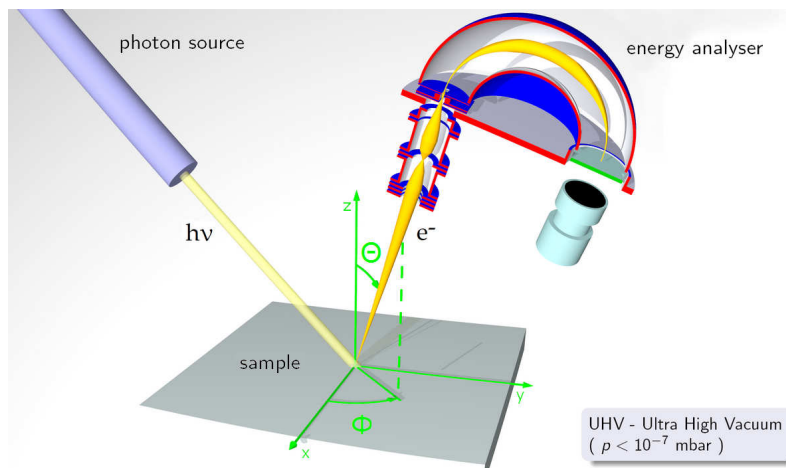


Fig. 2.10. Geometría de un experimento ARPES en la cual la dirección de emisión de los electrones se especifica por los ángulos polar (θ) y acimutal (ϕ).

En general, el momento lineal de estos electrones se determina de la siguiente forma: su módulo está dado por $p = \sqrt{2mE_{kin}}$ y sus componentes paralela y perpendicular a la superficie de la muestra se obtienen de los ángulos de emisión polar (θ) y acimutal (φ). En particular, la energía cinética y el momento lineal del electrón se relacionan con la energía de amarre E_B y el momento cristalino $\hbar\mathbf{k}$ dentro del sólido como

$$E_{kin} = h\nu - \phi - |E_B| \quad (2.3)$$

y

$$\mathbf{p}_{\parallel} = \hbar\mathbf{k}_{\parallel} = \sqrt{2mE_{kin}} \cdot \sin\theta, \quad (2.4)$$

donde $\hbar\mathbf{k}_{\parallel}$ es la componente paralela a la superficie del momento cristalino. La componente perpendicular del vector de onda (\mathbf{k}_{\perp}) no se conserva, debido a la ausencia de simetría traslacional en la dirección perpendicular a la superficie. De esta manera, midiendo el espectro de energías de los electrones emitidos en todas las direcciones se obtiene la estructura de bandas electrónicas de la muestra como se ilustra esquemáticamente en la Fig. 2.11.

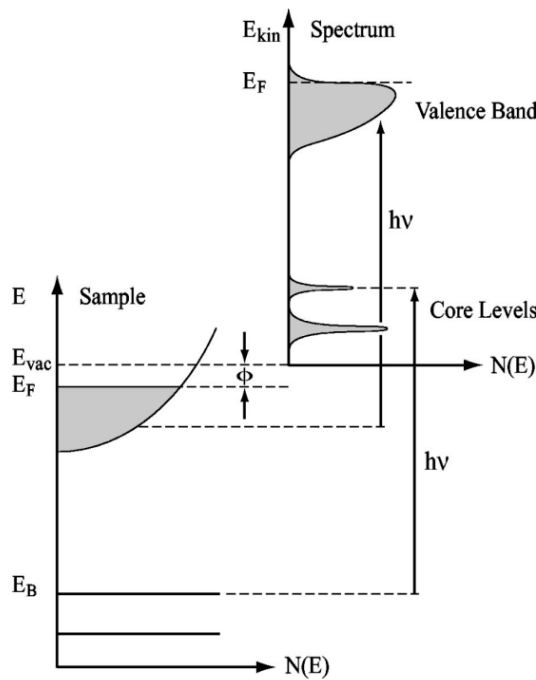


Fig. 2.11. Espectro de energías de los electrones emitidos obtenido a partir de la estructura de bandas electrónicas de la muestra [Damascelli,2003].

• Superficie de Fermi

La energía de Fermi (E_F) puede medirse a partir de la máxima energía cinética de los electrones emitidos como se ve en la Fig. 2.11 y la superficie de Fermi se determina mediante diferentes vectores de onda (\mathbf{k}) manteniendo E_F . En particular, para un sistema anisotrópico esencialmente bidimensional donde la superficie de Fermi es prácticamente cilíndrica, la determinación de dicha superficie se realiza fijando la energía E_{kin} en el detector y el ángulo acimutal φ del mismo, pero variando el ángulo polar θ

para buscar la máxima intensidad de la señal (ver Fig. 2.12) donde la esfera de radio determinado por E_{kin} cruza con la superficie de Fermi. La ubicación de estos máximos determina las componentes x y y del vector de onda paralelo a la superficie de la muestra a través de las siguientes ecuaciones

$$k_x = \sqrt{\frac{2mE_{kin}}{\hbar^2}} \cdot \sin \theta \cos \varphi \quad \text{y} \quad k_y = \sqrt{\frac{2mE_{kin}}{\hbar^2}} \cdot \sin \theta \sin \varphi \quad (2.5)$$

El mismo proceso se repite para distintos valores de φ y de esta manera se puede mapear toda la superficie de Fermi.

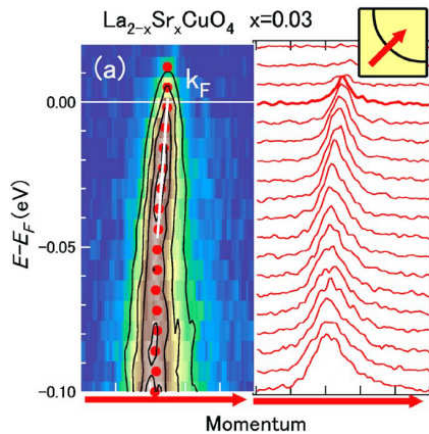


Fig. 2.12 Intensidad del haz de fotoelectrones por ARPES en $\text{La}_{1.97}\text{Sr}_{0.03}\text{CuO}_4$ como función del ángulo polar θ para diferentes energías E_{kin} [Yoshida, 2006].

• Brecha Superconductor

Una vez encontrada la superficie de Fermi para $T > T_c$, se puede medir la brecha superconductor barriendo la energía E_{kin} para ángulos específicos de θ , φ y diferentes temperaturas, como se muestra en la Fig 2.13.

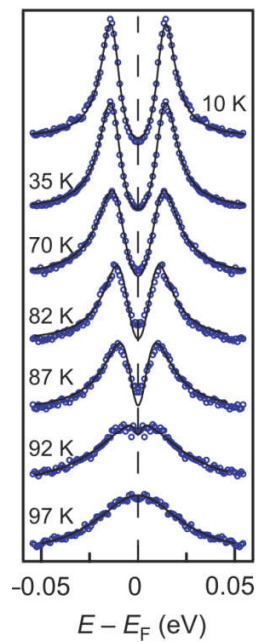


Fig. 2.14 Intensidad del haz de fotoelectrones por ARPES en $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ con $T_c = 92\text{K}$ como función de la energía para distintas temperaturas [Lee, 2007].

En la Fig. 2.14, la brecha superconductora se determina a partir de la distancia entre los dos picos de las curvas mostradas para diferentes temperaturas. Estas curvas se modifican para diferentes ángulos φ conduciendo a diferentes valores de la brecha superconductora, como se muestra en la Fig. 2.7.

Capítulo 3 Teoría versus Experimento

En este capítulo mostramos un método para calcular cantidades termodinámicas de superconductores reales. Este método se basa en extraer los parámetros del hamiltoniano de Hubbard directamente de las superficies de Fermi obtenidas a partir de los experimentos de ARPES para cupratos superconductores.

3.1 Ecuaciones de BCS en el Modelo de Hubbard

En esta sección escribiremos las ecuaciones de la teoría BCS a partir del hamiltoniano de Hubbard generalizado para una red cuadrada, el cual introducido en la sección 1.3 está dado por

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t'_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} \\ & + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} (\hat{n}_{i,-\sigma} + \hat{n}_{j,-\sigma}) + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \hat{n}_l \end{aligned} \quad (3.1)$$

donde $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$ ($\hat{c}_{i,\sigma}$) es el operador de creación (aniquilación) con espín $\sigma = \uparrow$ ó \downarrow en el sitio i , $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}$ es el operador de número y la ocupación electrónica total en el sitio i es $\hat{n}_i = \hat{n}_{i,\uparrow} + \hat{n}_{i,\downarrow}$. Los símbolos $\langle i, j \rangle$ y $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ indican que los sitios i y j son primeros y segundos vecinos, respectivamente. Usando la transformada de Fourier dada por

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \\ \hat{c}_{i,\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde N_s es el número de celdas unitarias del sólido, podemos pasar al espacio recíproco. En las relaciones (3.2), $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ y $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ son respectivamente los operadores de creación y aniquilación para un electrón con vector de onda \mathbf{k} y espín σ . De esta manera el hamiltoniano de Hubbard generalizado en el espacio recíproco para el caso de espín singlete se expresa como [Pérez, 2002]

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \uparrow} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \sigma} W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \quad (3.3)$$

donde

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_0 + 2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a), \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} = & U + \Delta t [\beta(\mathbf{q} + \mathbf{k}) + \beta(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + \beta(\mathbf{q} + \mathbf{k}') + \beta(\mathbf{q} - \mathbf{k}')] \\ & + \Delta t_3 [\gamma(\mathbf{q} + \mathbf{k}, \mathbf{q} + \mathbf{k}') + \gamma(\mathbf{q} - \mathbf{k}, \mathbf{q} - \mathbf{k}')], \end{aligned} \quad (3.5)$$

y

$$W_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} = \Delta t_3 \gamma(\mathbf{q} + \mathbf{k}, \mathbf{q} + \mathbf{k}'), \quad (3.6)$$

siendo

$$\beta(\mathbf{k}) = 2 \left[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) \right] \quad (3.7)$$

y

$$\gamma(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 4 \cos(k_x a) \cos(k'_y a) + 4 \cos(k'_x a) \cos(k_y a). \quad (3.8)$$

y $2\mathbf{q}$ es el vector de onda del centro de masa del par. Para una red cuadrada las integrales de salto entre primeros y segundos vecinos son respectivamente $t_{i,j}=t$ y $t'_{i,j}=t'$ en ausencia de campo magnético. Por otro lado, hemos considerado $V=0$ ya que el apantallamiento de medios polarizables en un sólido disminuye significativamente la interacción coulombiana entre vecinos conduciendo a $V \ll U$. Además, existe una interacción indirecta mediante fonones, en lugar de fotones, que puede ser atractiva, por lo que la interacción neta entre electrones de primeros vecinos puede ser pequeña y en este trabajo hemos considerado $V \approx 0$, con el fin de evitar la formación de un estado en el cual se acumulan electrones en una fracción de la red.

Después de un desacoplamiento estándar Hartree-Fock de los términos de interacción con $\mathbf{q} \neq 0$ [Dagotto, 1994] aplicado a la ecuación (3.3), el hamiltoniano reducido para $\mathbf{q} = 0$ es

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{MF}(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\uparrow} \\ & + \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\sigma} W_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

donde la relación de dispersión de campo medio con parámetro de red a está dada por

$$\varepsilon_{MF}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{eff} + 2t_{eff} \left[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) \right] + 4t'_{eff} \cos(k_x a) \cos(k_y a) \quad (3.10)$$

donde

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon_0 + \frac{nU}{2}, \quad (3.11)$$

$$t_{eff} = t + n\Delta t, \quad (3.12)$$

y

$$t'_{eff} = t' + 2n\Delta t_3. \quad (3.13)$$

Vemos que el hamiltoniano (3.9) tiene la misma forma que el hamiltoniano de BCS dado por la ecuación (1.23). Por lo tanto, aplicando el formalismo discutido en la sección 1.1 encontramos la ecuación que determina la brecha superconductora a temperatura finita para el hamiltoniano de Hubbard generalizado [Pérez, 2002]

$$\Delta_{\mathbf{k}}(T) = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',0} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}(T)}{2E_{\mathbf{k}'}(T)} (1 - 2f_{\mathbf{k}'}), \quad (3.14)$$

donde

$$E_{\mathbf{k}}(T) \equiv \sqrt{(\varepsilon_{MF}(\mathbf{k}) - \mu)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2(T)}, \quad (3.15)$$

siendo μ el potencial químico. En general, el potencial químico depende del llenado de la banda y de la temperatura. Haciendo un análisis similar a la brecha superconductor se obtiene la siguiente ecuación [Rickayzen, 1965] [Hirsch, 1989]

$$n-1 = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon_{MF}(\mathbf{k}) - \mu}{E_{\mathbf{k}}(T)} \tanh\left[\frac{E_{\mathbf{k}}(T)}{k_B T}\right], \quad (3.16)$$

donde $n = N/N_s$ es el número de partículas por celda unitaria, siendo N el número de partículas descritas por el hamiltoniano (3.1).

Para estudiar superconductividad con simetría $d_{x^2-y^2}$ proponemos que la brecha superconductor tiene la forma $\Delta_{\mathbf{k}}(T) = \Delta_d [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]$, de esta manera la ecuación (3.14) se convierte en [Pérez, 2002]

$$1 = \frac{4\Delta_t a^2}{8\pi^2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_x dk_y \frac{[\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2}{E(\mathbf{k})} \tanh\left(\frac{E(\mathbf{k})}{2k_B T}\right), \quad (3.17)$$

donde la doble integral es siempre positiva y por lo tanto $\Delta_t > 0$ induce la formación de un estado superconductor con simetría d sin necesidad de una interacción negativa. Además dicho estado superconductor persiste aun cuando $\Delta_t \ll U$.

3.2 Determinación de Parámetros a partir de ARPES

Como mencionamos en la sección 2.3, los experimentos de ARPES pueden revelar la superficie de Fermi. En particular, se han hecho mediciones para $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ con diferentes niveles de dopaje x , cuyos datos se muestran con círculos rojos abiertos en la Fig. 3.1 [Yoshida, 2006]. Del lado derecho vemos los datos para las superficies de Fermi en la primera y segunda zona de Brillouin. Mediante el método de mínimos cuadrados ajustamos los datos experimentales minimizando su dispersión con respecto a la relación de dispersión (3.10) como muestran los cuadros azules en la Fig. 3.1. A partir de las curvas de nivel de la relación de dispersión a la energía de Fermi mostradas en las Figs. 3.1(a-e) sólo se pueden determinar las razones t'_{eff}/t_{eff} y $\varepsilon_{eff}/t_{eff}$. Para encontrar t_{eff} utilizamos los resultados de la relación de dispersión medidas en las direcciones $(0,0) - (\pi,0) - (\pi,\pi)$ de las Figs. 3.1(a'-e').

En la Tabla 3.1 se muestran los parámetros obtenidos del ajuste, donde las últimas dos columnas n y Δ_t serán explicadas más adelante.

Tabla 3.1 Parámetros del modelo determinados a partir de ARPES.

x	t_{eff} (eV)	t'_{eff} (eV)	ε_{eff} (eV)	n	Δ_t
0.03	-0.25	0.097	0.199	1.002	0.021
0.07	-0.25	0.077	0.209	0.938	0.021
0.15	-0.25	0.064	0.260	0.761	0.021
0.22	-0.25	0.060	0.268	0.716	0.021
0.30	-0.25	0.056	0.290	0.655	0.021

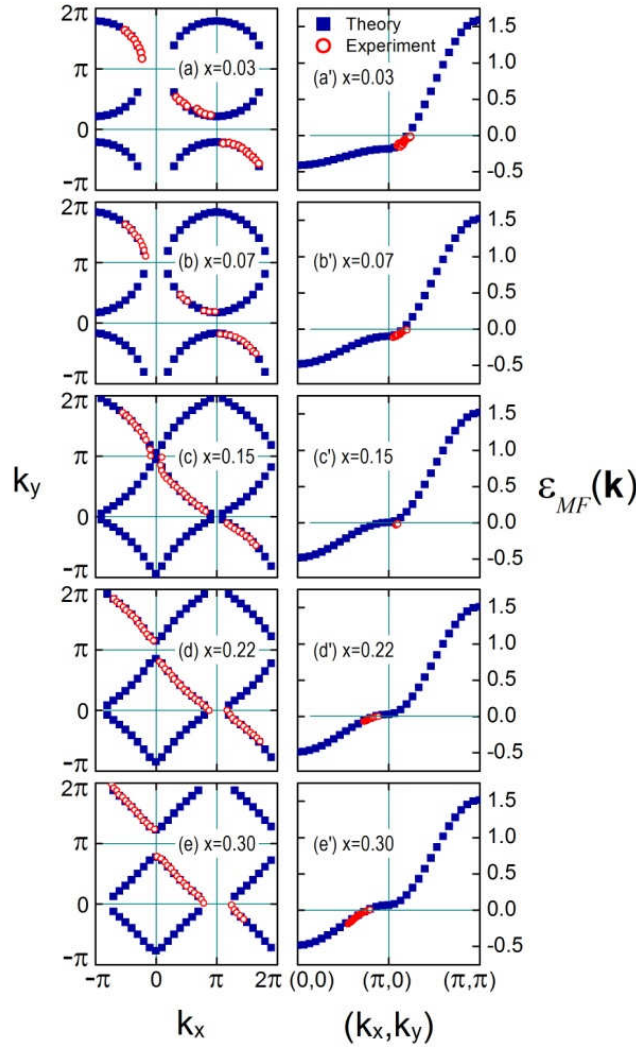


Fig. 3.1 Datos de ARPES obtenidos de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (círculos abiertos rojos) con diferentes niveles de dopaje (x) en comparación con la relación de dispersión (cuadrados sólidos azules) calculada al nivel de Fermi (a)-(e), así como a lo largo de las direcciones $(0,0) - (\pi,0) - (\pi,\pi)$ mostradas en (a')-(e').

Una vez obtenidos los parámetros efectivos, se puede calcular la densidad de estados (DOS) dada por [Economou, 2006]

$$DOS(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \text{Im} \left[\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E - \epsilon_{MF}(\mathbf{k}) + i\eta} \right], \quad (3.18)$$

donde $\epsilon_{MF}(\mathbf{k})$ es la relación de dispersión en la aproximación de campo medio dada por la ecuación (3.10). Las $DOS(E)$ para $x = 0.03, 0.07, 0.15, 0.22, 0.30$ se muestran respectivamente en las Figs. 3.1(a-e). Nótese que para $x = 0.15$, el nivel de Fermi (E_F) coincide con la singularidad de van Hove, donde el número de electrones disponibles aumenta significativamente. Por esta razón se espera que existan más portadores disponibles para formar pares de Cooper, y entre más pares de Cooper tengamos se necesitará más energía para romper la superconductividad, por lo tanto se espera que en este nivel de dopaje se tenga la máxima temperatura crítica.

La densidad electrónica (n) se puede obtener integrando (3.18) hasta la energía de Fermi, es decir,

$$n = \int_{-\infty}^0 DOS(E) dE, \quad (3.19)$$

cuyos valores numéricos se encuentran en la Tabla 3.1. Vemos que conforme aumenta el nivel de dopaje disminuye la densidad electrónica, lo cual implica que aumenta la concentración de huecos, que como ya se mencionó en el capítulo anterior, son los causantes de la superconductividad para los cupratos superconductores.

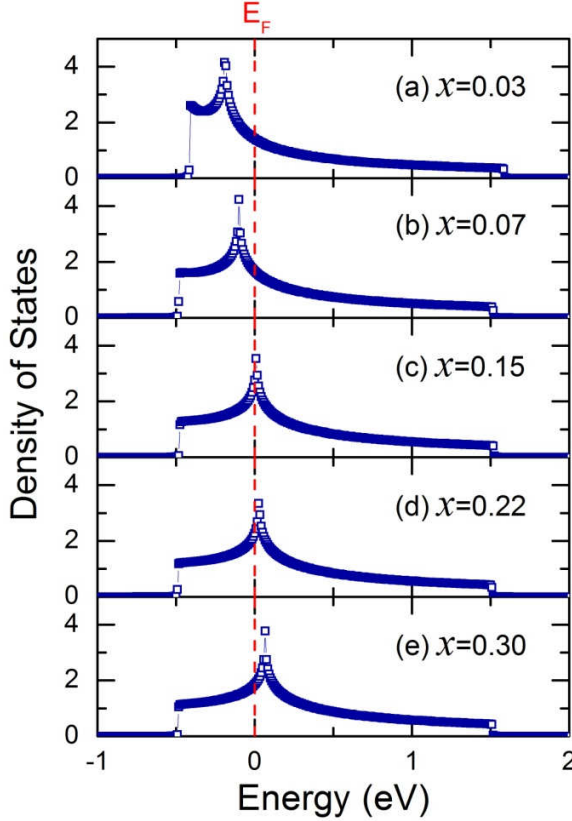


Fig. 3.2 Densidad de estados (*DOS*) para $x = 0.03, 0.07, 0.15, 0.22$ y 0.30 calculadas a partir de la relación de dispersión (3.10) con los parámetros efectivos mostrados en la Tabla 3.1.

3.3 Propiedades Termodinámicas

La temperatura crítica (T_c) se puede obtener de la ecuación (3.17) tomando $\Delta_d(T_c) = 0$ a través de la ecuación (3.15). Para determinar el valor de Δ_3 , escogemos la máxima $T_c = 41$ K en $x = 0.15$ de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [Yoshida, 2006], la cual conduce a $\Delta_3 = 0.021$ eV. En la Fig. 3.3, se muestra la T_c (triángulos sólidos) calculada como función de la concentración de Sr (x) comparada con los datos experimentales de N. Momono *et al.* [Momono, 1994] (círculos abiertos) y de T Yoshida, *et al.* [Yoshida, 2006] (cuadrados abiertos). Nótese que hay una buena coincidencia de T_c entre teoría y experimento, a pesar de que el Δ_3 obtenido a partir de $T_c = 41$ K se utiliza para el cálculo de T_c de todos los demás niveles de dopaje. Así mismo, la energía de Fermi en la singularidad de van Hove (ver Fig. 3.2) parece ser un criterio crucial para la determinación de la máxima T_c en concordancia con la teoría BCS, como se expresa en la ecuación (1.42). En el recuadro de la Fig. 3.3 se ilustra la T_c como función de n calculada a partir de los parámetros de la Tabla 3.1 para $x = 0.15$ (cuadrados sólidos) y $x = 0.22$ (círculos sólidos), donde los valores correspondientes de x están indicados por las líneas segmentadas.

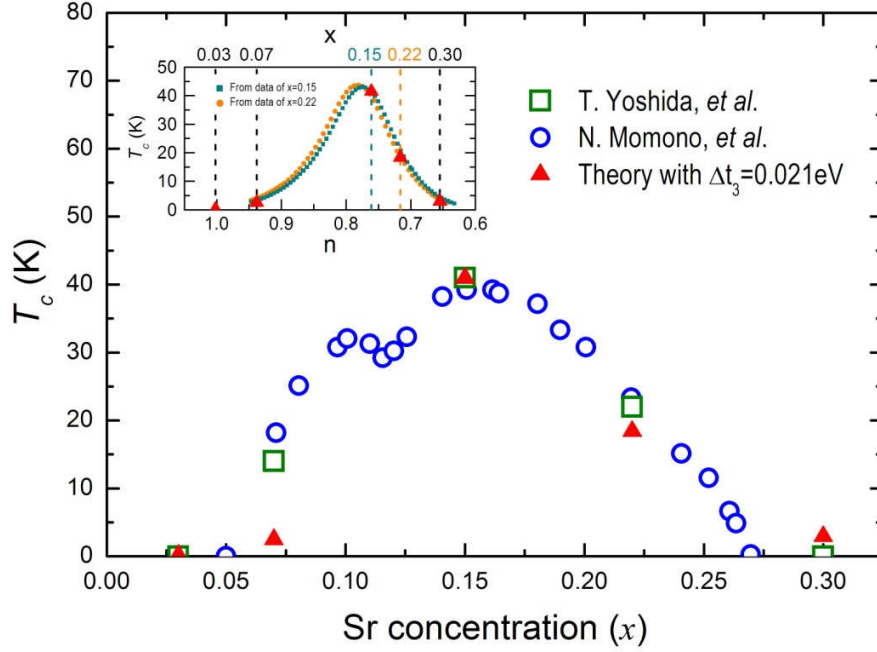


Fig. 3.3 Temperatura crítica (T_c) teórica (triángulos sólidos) como función de la concentración de Sr (x) en comparación con los datos experimentales de T. Yoshida *et al.* (cuadrados abiertos) y N. Momono *et al.* (círculos abiertos). Recuadro: T_c vs n para los parámetros del hamiltoniano obtenidos de $x=0.15$ (cuadrados sólidos) y $x=0.22$ (círculos sólidos) con los valores de x indicados con líneas segmentadas.

Otra de las propiedades termodinámicas que da información acerca de la simetría del estado superconductor es el calor específico electrónico (C_{el}), el cual está dado por [Tinkham, 1996]

$$C_{el} = \frac{2k_B\beta^2\alpha^2}{4\pi^2} \iint_{1BZ} f[E(\mathbf{k})]\{1-f[E(\mathbf{k})]\} \left[E^2(\mathbf{k}) + \beta E(\mathbf{k}) \frac{dE(\mathbf{k})}{d\beta} \right] dk_x dk_y, \quad (3.20)$$

donde $\beta = 1/(k_B T)$ y $f(E)$ es la distribución de Fermi-Dirac. El calor específico del estado normal se puede obtener tomando $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$ en las ecuaciones (3.15) y (3.20). En la Fig. 3.4 se muestra el C_{el} teórico (triángulos abiertos) para la muestra con $x=0.15$ usando los parámetros de la Tabla 3.1 comparado con los datos experimentales disponibles de C_{el} para una muestra de $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ con nivel de dopaje semejante $x=0.14$ [Matsuzaki, 2004]. Nótese que los resultados teóricos revelan un comportamiento de ley de potencias a segundo orden, de acuerdo con los datos experimentales, porque el comportamiento a bajas temperaturas del C_{el} es sensible a la existencia de nodos en la brecha. Sin embargo, hay una diferencia entre los datos teóricos y experimentales en la posición y la magnitud del máximo C_{el} . La primera podría ser debido a que la muestra usada para el cálculo teórico tiene una T_c de 41 K para $x=0.15$, en contraste con la T_c de 37 K obtenida para la muestra de $x=0.14$ [Matsuzaki, 2004]. La segunda podría estar relacionada con la limitación de nuestro modelo

bidimensional de una sola banda electrónica. A pesar de su simplicidad, el comportamiento lineal de C_{el} en el estado normal y la discontinuidad entre el estado normal y superconductor se reproducen bien.

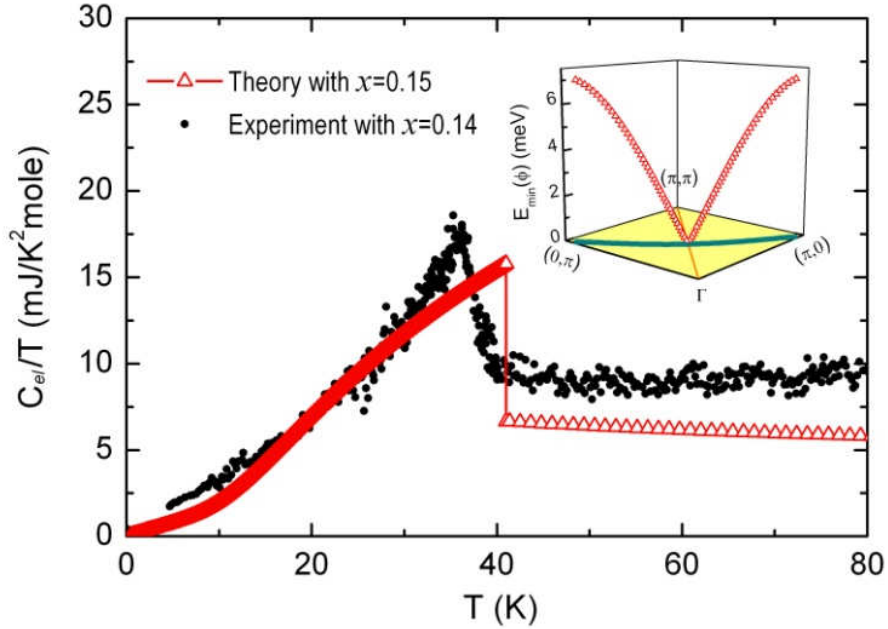


Fig. 3.4 Calor específico electrónico con simetría d (C_{el}) versus la temperatura (T) para $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ con $x=0.15$ en comparación con el experimental (círculos sólidos) para $x=0.14$ [Matsuzaki, 2004]. Recuadro: energía de excitación (triángulos abiertos) en la primera zona de Brillouin.

El recuadro en la Fig. 3.4 muestra en la primera zona de Brillouin la energía de excitación (triángulos abiertos) definida como el valor mínimo de $E(\phi)$ a lo largo de la dirección $\phi \equiv \tan^{-1}(k_y/k_x)$. La proyección de $E_{\min}(\phi)$ (línea verde) se ilustra en la Fig. 3.1(a). Obsérvese que $E_{\min}(\phi)$ tiene simetría d con un máximo valor de 7.12 meV, el cual se acerca a 8.5 meV reportado por D.L. Feng *et al.* [Feng, 2002], 8.6 meV por A. Ino *et al.* [Ino, 2002] y 13.8 meV por M. Shi *et al.* [Shi, 2008]. Además, la razón de la energía de excitación en la dirección antinodal, por ejemplo a $\phi=0$, sobre $k_B T$ es 2.015, el cual es mayor que 1.764 de la teoría BCS [Tinkham, 1996].

Capítulo 4 Superconductividad en Campo Magnético

Magnético

Como vimos en el capítulo anterior, el modelo de Hubbard generalizado escrito en el espacio recíproco puede utilizarse dentro del formalismo de BCS para analizar la brecha superconductora, la temperatura crítica y otras propiedades físicas de la superconductividad anisotrópica. En este capítulo, extendemos dicho análisis al estudio de la superconductividad en presencia de campo magnético usando el formalismo de Bogoliubov-de Gennes, presentado en la sección 1.2. En la siguiente sección se introduce al estado mixto de los superconductores tipo II cuando la intensidad de campo magnético externo (H) cumple la condición $H_{c1} < H < H_{c2}$.

4.1 Propiedades del Estado Mixto

Los superconductores se pueden dividir en dos clases: tipo I y tipo II. En los primeros existe un campo crítico H_c tal que, si la muestra se encuentra sumergida en un campo $H < H_c$, ésta expulsa totalmente el campo de su interior, lo cual es conocido como el efecto Meissner. Cuando $H > H_c$ se pierden por completo las propiedades superconductoras permitiendo entrar las líneas de flujo en su totalidad.

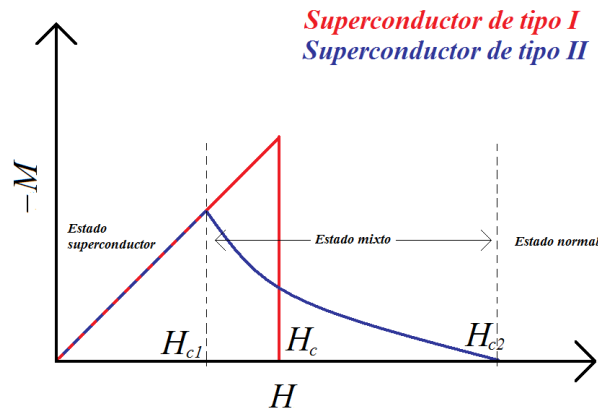


Fig. 4.1 Magnetización de superconductores tipo I y II representados respectivamente por las líneas roja y azul. La magnetización es cero para $H > H_c$ en el primer caso y disminuye gradualmente entre $H_{c1} < H < H_{c2}$ en el segundo.

En la Fig. 4.1 M es la magnetización dada por

$$M = \frac{B - H}{4\pi}, \quad (4.1)$$

donde B es la inducción magnética y H el campo magnético externo. Un superconductor tipo II expulsa totalmente el flujo magnético cuando el campo aplicado es menor que el primer campo crítico H_{c1} y cuando $H > H_{c1}$, existen líneas de flujo que penetran parcialmente la muestra. El flujo ϕ que pasa a través del superconductor es menor que el que atraviesa a la muestra cuando se encuentra en el estado normal. Esto implica la coexistencia de zonas normales y superconductoras en la muestra. Esta

situación se da cuando el campo magnético aplicado es menor que el segundo campo crítico H_{c2} . Para $H > H_{c2}$ el material pierde las propiedades superconductoras, es decir, no expulsa las líneas de flujo y la inducción magnética toma el mismo valor del campo H . En otras palabras, cuando el superconductor tipo II se encuentra en el intervalo $H_{c1} < H < H_{c2}$ se dice que está en el *estado mixto*.

Cabe mencionar que el campo magnético es nulo en el interior de un superconductor tipo I y sólo penetra una longitud de London definida en la ecuación (1.4). Sin embargo, dependiendo de la geometría de un superconductor, pueden existir zonas normales con campo magnético diferente de cero aún en superconductores tipo I, ya que la densidad de flujo del campo magnético puede superar localmente el campo crítico. Un ejemplo de ello es una esfera superconductora sometida a un campo magnético H_0 como se muestra en la Fig. 4.2.

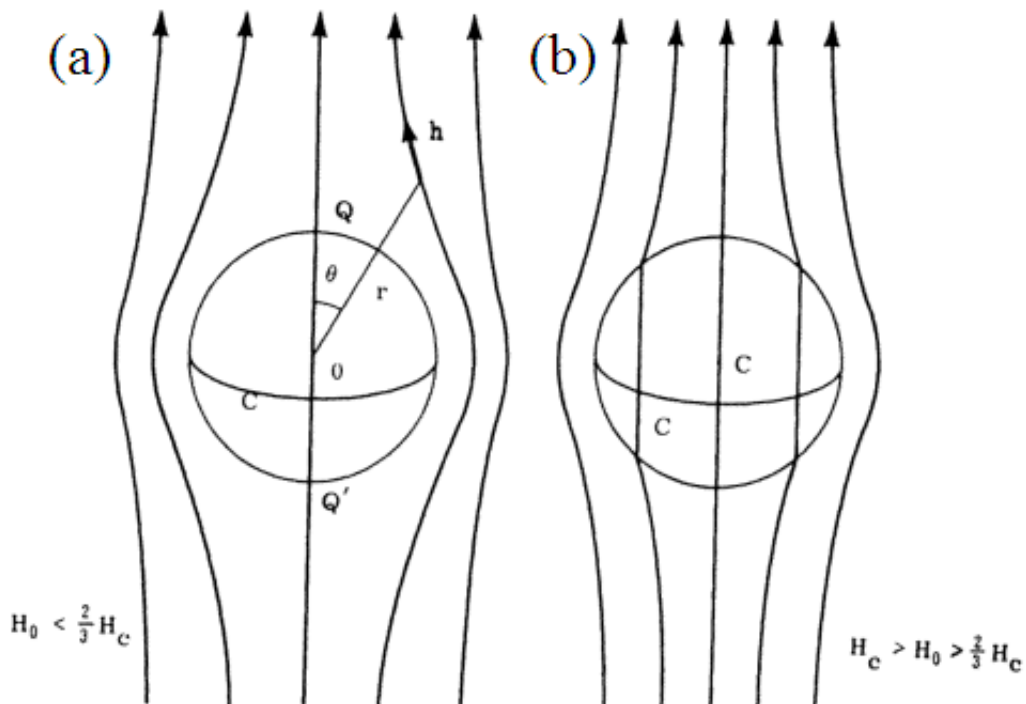


Fig. 4.2 Esfera superconductora tipo I en un campo magnético H_0 (a) menor que $\frac{2}{3}H_c$, habiendo un efecto Meissner en toda la esfera, (b) $\frac{2}{3}H_c < H_0 < H_c$, donde la esfera se encuentra en estado intermedio.

El efecto Meissner en toda la esfera se obtiene únicamente para valores del campo $H_0 < \frac{2}{3}H_c$, ya que el campo en el ecuador de ésta es de $\frac{3}{2}H_0$ [De Gennes, 1989]. Cuando la esfera se encuentra en $\frac{2}{3}H_c < H_0 < H_c$, la geometría de la misma obliga a tener ciertas zonas en estado normal y otras en estado superconductor. A esta coexistencia del estado normal y el estado superconductor en superconductores tipo I se le conoce como *estado intermedio*. No debemos confundir el estado intermedio con el estado mixto descrito anteriormente. El primero es resultado únicamente de la geometría del superconductor y el segundo es debido a la energía superficial negativa entre la zona

normal y la superconductor, la cual describimos a partir de la teoría de Ginzburg-Landau a continuación.

• Teoría de Ginzburg-Landau

En 1950 Vitaly Lazarevich Ginzburg y Lev Davidovich Landau [Ginzburg, 1950] introdujeron un parámetro de orden ψ que describe a los electrones que participan en la superconductividad y cuya norma cuadrada $n_s = |\psi|^2$ es la densidad de electrones superconductores tal y como se definió en la ecuación (1.4) de la teoría de London. A partir de una expansión en serie de la densidad de energía libre de Helmholtz (f) se puede escribir [Tinkham, 1996]

$$f_s(B) = f_n(0) + \alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + \frac{B^2}{8\pi}, \quad (4.2)$$

donde α y β son los coeficientes de la expansión, m^* y e^* son respectivamente la masa y la carga de los super-electrones, \mathbf{A} es el potencial vectorial y $f_n(0) + B^2/8\pi = f_n(B)$ es la energía libre en el estado normal. El mínimo de la energía en ausencia de campos y gradientes ocurre cuando

$$|\psi|^2 = |\psi_\infty|^2 \equiv -\frac{\alpha}{\beta}, \quad (4.3)$$

donde $\alpha < 0$ ya que en el caso contrario el mínimo se encuentra en $|\psi| = 0$ que corresponde al estado normal. Dado que $f_s(0) - f_n(0) = -H_c^2/8\pi$ [Poole, 2007], sustituyendo (4.3) en (4.2) para el caso sin campo obtenemos

$$\frac{-H_c^2}{8\pi} = f_s(0) - f_n(0) = \frac{-\alpha^2}{2\beta}. \quad (4.4)$$

Aplicando el método variacional con respecto a ψ^* la ecuación (4.2) se llega a

$$\alpha \psi + \beta |\psi|^2 \psi + \frac{1}{2m^*} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right)^2 \psi = 0. \quad (4.5)$$

La ecuación (4.5) puede visualizarse como una ecuación de Schrödinger con potencial cero y un término no lineal, cuya supercorriente está dada por

$$\mathbf{j}_s = \frac{e^*}{2m^*} \left[\psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \psi + \psi \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \psi^* \right] = \frac{e^* \hbar}{2m^* i} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{e^{*2}}{m^* c} \mathbf{A} \psi \psi^*. \quad (4.6)$$

Las ecuaciones (4.5) y (4.6) se conocen como las ecuaciones de Ginzburg-Landau (GL). En ausencia de campo magnético, la ecuación (4.5) en términos de la función de onda adimensional dada por

$$s \equiv \psi / \psi_\infty \quad (4.7)$$

y usando la ecuación (4.3), puede reescribirse para sistemas donde la función de onda varía sólo en la dirección x como

$$\frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha|} \frac{d^2s}{dx^2} + s - s^3 = 0. \quad (4.8)$$

Se propone que la función de onda superconductor normalizada es esencialmente 1 de la forma $s(x) = 1 + w(x)$ con $w(x) \ll 1$ por lo que la ecuación (4.8) queda de la forma

$$0 = \xi^2 w''(x) + (1 + w) - (1 + 3w + \dots) \approx \xi^2 w''(x) - 2w, \quad (4.9)$$

cuya solución es

$$w(x) \sim e^{\pm\sqrt{2}x/\xi(T)}, \quad (4.10)$$

la cual muestra que la función de onda superconductor decae con una distancia característica de $\xi(T)$ conocida como la longitud de coherencia de GL [Tinkham, 1996].

$$\xi(T) = \frac{\hbar}{|2m^*\alpha(T)|^{1/2}}, \quad (4.11)$$

Por otro lado, de la ecuación (4.6) se tiene

$$\nabla \times \mathbf{j}_s = -\frac{(e^*)^2 |\psi|^2}{m^*c} \nabla \times \mathbf{A} = -\frac{(e^*)^2 |\psi|^2}{m^*c} \mathbf{B}. \quad (4.12)$$

Comparando con las ecuaciones (4.12) y (1.3) se concluye que la longitud de penetración de London es

$$\lambda_L = \frac{m^*c^2}{4\pi |\psi|^2 (e^*)^2}. \quad (4.13)$$

Identificando $n_s^* = |\psi|^2$, la ecuación (4.13) es prácticamente la longitud de penetración de la teoría de London con $m^* = 2m$, $e^* = 2e$ y $n_s^* = n_s/2$, es decir, n_s es el número de pares de electrones. Con esta convención $n_s^*(e^*)^2/m^* = n_s e^2/m$.

De las ecuaciones (4.3), (4.4) y (4.13) se obtienen

$$\begin{aligned} |\psi|^2 &\equiv n_s^* \equiv \frac{n_s}{2} = \frac{m^*c^2}{4\pi e^{*2}\lambda_L^2} = \frac{mc^2}{8\pi e^2\lambda_L^2}, \\ \alpha(T) &= -\frac{e^{*2}}{m^*c^2} H_c^2(T) \lambda_L^2(T) = -\frac{2e^2}{mc^2} H_c^2(T) \lambda_L^2(T), \\ \beta(T) &= \frac{4\pi e^{*4}}{m^{*2}c^4} H_c^2(T) \lambda_L^4(T) = \frac{16\pi e^4}{m^2c^4} H_c^2(T) \lambda_L^4(T). \end{aligned} \quad (4.14)$$

El parámetro de GL (κ) se define como el cociente entre longitud de penetración y la longitud de coherencia,

$$\kappa \equiv \frac{\lambda_L}{\xi}, \quad (4.15)$$

el cual se usa para diferenciar un superconductor tipo I con $\kappa < 1/\sqrt{2}$ de un tipo II con $\kappa > 1/\sqrt{2}$ debido a que en el primer caso se tiene una energía superficial positiva y en el segundo negativa como se discute a continuación.

• Energía Superficial

Dado que los dominios superconductor y normal coexisten en presencia de campo $H \approx H_c$ como muestra la Fig. 4.4, consideremos una interfase que separa el dominio superconductor ($x > 0$) y el normal ($x < 0$) por una pared localizada a lo largo del plano yz en $x = 0$. Buscamos soluciones de las ecuaciones (4.5) y (4.6) con condiciones a la frontera de la forma

$$\begin{aligned} \psi = 0 \quad \text{y} \quad B = H_c \quad \text{cuando} \quad x \rightarrow -\infty \\ \psi = \psi_\infty \quad \text{y} \quad \mathbf{B} = 0 \quad \text{cuando} \quad x \rightarrow +\infty. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Para estados ligados en sistemas unidimensionales, la función de onda ψ puede tomarse como real [Griffiths, 2005], entonces la ecuación (4.5) se convierte en

$$\alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi = \frac{1}{2m^*} \left(\hbar^2 \nabla^2 \psi - \frac{e^{*2}}{c^2} \mathbf{A}^2 \psi \right), \quad (4.17)$$

donde hemos eliminado los términos cruzados de ∇ y \mathbf{A} ya que el lado izquierdo de la ecuación es real y por lo tanto la parte imaginaria del lado derecho debe ser cero. Del mismo modo, la ecuación (4.6) se reduce a

$$\mathbf{j}_s = -\frac{e^{*2}}{m^*c} \mathbf{A} |\psi|^2. \quad (4.18)$$

Ya que la variable de este estudio es el campo magnético en lugar de la magnetización, tenemos que calcular la energía libre de Gibbs por unidad de volumen [Tinkham, 1996]

$$g = f - MH, \quad (4.19)$$

donde f es la densidad de la energía libre de Helmholtz, M es la magnetización del material y H es el campo magnético externo discutidos en la ecuación (4.1). Para $H = H_c$ la energía libre de Gibbs por unidad de volumen en la fase homogénea (g_1) está dada por

$$g_1 = f_n(H_c) - MH_c = f_n(0) + \frac{H_c^2}{8\pi} \quad (4.20)$$

donde la magnetización $M \approx 0$ para superconductores habitualmente no magnéticos en su estado normal y la energía contenida en el campo magnético es $H_c^2/8\pi$. En la fase mixta la energía libre de Gibbs por unidad de volumen es

$$g_2 = \begin{cases} f_n(0) + \frac{H_c^2}{8\pi} & \text{si } x < 0 \\ f_s(B) - MH_c & \text{si } x > 0 \end{cases}, \quad (4.21)$$

donde $f_s(B)$ está dada por la ecuación (4.2). La energía superficial (σ_{ns}) se define como la diferencia entre la energía libre por unidad de área entre la fase homogénea y la fase mixta, es decir,

$$\sigma_{ns} = \int_{-\infty}^{\infty} (g_2 - g_1) dx = \int_0^{\infty} \left[\alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + 2\pi M^2 \right] dx \quad (4.22)$$

donde hemos expresado la inducción magnética (B) en términos de la magnetización (M) dada por la ecuación (4.1). Multiplicando la ecuación (4.17) por ψ^* e integrando por partes obtenemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[\alpha |\psi|^2 + \beta |\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 \right] dx = 0, \quad (4.23)$$

y restando (4.23) a (4.22) llegamos a

$$\sigma_{ns} = \int_0^{\infty} \left(-\frac{\beta}{2} |\psi|^4 + 2\pi M^2 \right) dx. \quad (4.24)$$

El primer término de la ecuación (4.24) representa la energía ganada por la condensación en el estado superconductor, mientras que el segundo término es el costo de excluir el flujo en la interfase. Si definimos las cantidades adimensionales como en la ecuación (4.7) y

$$m^2 \equiv \frac{4\pi\beta}{\alpha^2} M^2, \quad (4.25)$$

la ecuación (4.24) puede expresarse como

$$\sigma_{ns} = \left(\frac{\alpha^2}{2\beta} \right) \int_0^{\infty} (-s^4 + m^2) dx = \frac{H_c^2}{8\pi} \int_0^{\infty} [(1-s^4) - (1-m^2)] dx, \quad (4.26)$$

donde hemos usado la ecuación (4.4). Podemos estimar σ_{ns} observando que $s^4 = m^2 = 1$ en zonas lejanas a la interfase del lado superconductor. Además, s^4 es pequeña sólo en una distancia del orden de ξ , y m^2 es pequeña en una distancia del orden de λ_L a partir de la interfase. Esto significa que la energía superficial es aproximadamente

$$\sigma_{ns} \approx \frac{H_c^2}{8\pi} (\xi - \lambda_L). \quad (4.27)$$

Numéricamente se puede demostrar que la ecuación (4.26) se hace cero cuando $\kappa = 1/\sqrt{2}$ [Abrikosov, 1988], lo cual define a los superconductores de tipo I y II con el criterio

$$\begin{aligned} \kappa < \frac{1}{\sqrt{2}} & \text{ Tipo I} \\ \kappa > \frac{1}{\sqrt{2}} & \text{ Tipo II.} \end{aligned} \quad (4.28)$$

Cabe mencionar que la ecuación (4.26) tiene solución analítica sólo en los casos límite $\kappa \ll 1$ y $\kappa \gg 1$, las cuales se muestran a continuación. Para el caso $\kappa \ll 1$, la longitud de penetración es pequeña y podemos despreciar el efecto de \mathbf{A} en la ecuación (4.17), entonces [Tsuneto, 1998]

$$s = \tanh \left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi} \right) \quad (4.29)$$

y dado que el campo penetra muy poco, la magnetización normalizada $m = 1$, por lo tanto

$$\begin{aligned} \sigma_{ns} &= -\frac{H_c^2}{8\pi} \int_0^{\infty} \left[1 - \tanh^4 \left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi} \right) \right] dx \\ &= \left[x - x + \frac{4}{3} \sqrt{2}\xi \tanh \left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi} \right) - \frac{1}{3} \sqrt{2}\xi \tanh \left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi} \right) \operatorname{sech} \left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi} \right) \right]_0^{\infty} = \frac{4}{3} \sqrt{2}\xi. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Para el caso $\kappa \gg 1$, $s \rightarrow 1$ a una distancia ξ de $x=0$ y su efecto en la integral es despreciable, mientras que

$$m = \frac{4\pi M}{H_c} = \frac{4\pi(B - H_c)}{4\pi H_c} = \frac{H_c e^{-x/\lambda_L} - H_c}{H_c} = -(1 - e^{-x/\lambda_L}), \quad (4.31)$$

donde hemos usado la ecuación (1.5). De esta manera

$$\begin{aligned} \sigma_{ns} &= -\frac{H_c^2}{8\pi} \int_0^\infty [1 - (1 - e^{-x/\lambda_L})^2] dx = \frac{H_c^2}{8\pi} \int_0^\infty [-2e^{-x/\lambda_L} + e^{-2x/\lambda_L}] dx \\ &= \frac{H_c^2}{8\pi} \left(2\lambda_L e^{-x/\lambda_L} - \frac{\lambda_L}{2} e^{-2x/\lambda_L} \right) \Big|_0^\infty = \frac{H_c^2}{8\pi} \left(-2\lambda_L + \frac{\lambda_L}{2} \right) = -\frac{H_c^2}{8\pi} \frac{3}{2} \lambda_L. \end{aligned} \quad (4.32)$$

En resumen, la región normal y superconductor están divididas por interfases con energía superficial negativa en un superconductor tipo II. En consecuencia, el sistema baja su energía total maximizando el área global de dichas interfases [de Gennes, 1989], es decir, formando filamentos de región normal con un diámetro mínimo del orden de la longitud de coherencia ξ , como se muestra en la Fig. 4.3 que contiene un cuanto de flujo magnético dado por [Yang, 1962]

$$\Phi_0 = \frac{ch}{2e} = 2.07 \times 10^{-15} \text{ Tesla} \cdot \text{m}^2, \quad (4.33)$$

donde h es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz y e es la carga eléctrica del electrón. El campo es máximo en el centro del filamento y se extiende una distancia λ_L como se ilustra en la Fig. 4.3.

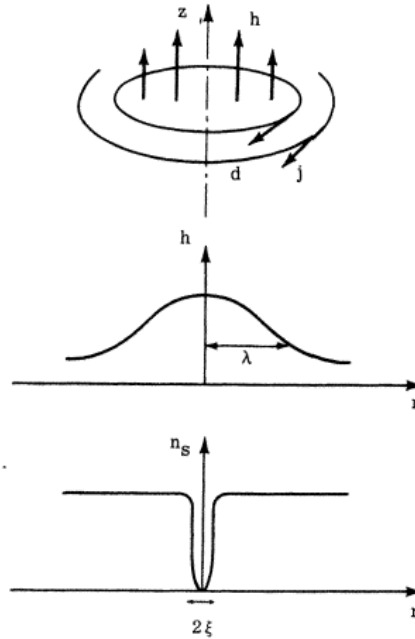


Fig. 4.3 Estructura de un vórtice en un superconductor tipo II. El campo magnético es máximo en el centro del vórtice y decae a una distancia λ_L , donde n_s es el número de electrones superconductores que se reduce alrededor del centro del vórtice en un radio ξ [De Gennes, 1989].

En 1957 Alexei A. Abrikosov demostró que los flujos magnéticos cuantizados -comúnmente llamados vórtices- se acomodan en una red triangular en los superconductores tipo II ideales [Abrikosov, 1957], ya que ésta constituye la red bidimensional más compacta, como se muestra en la Fig. 4.4.

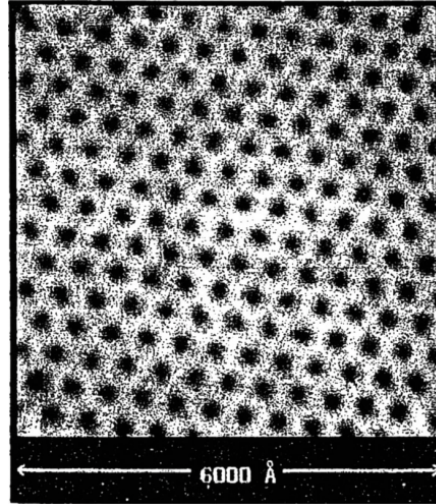


Fig. 4.4 Estructura de vórtices en NbSe₂, donde los puntos negros son cuantos de flujo magnético Φ_0 [Hess, 1989].

Para el caso $\lambda_L \gg \xi$, usando las ecuaciones de London (1.3), se puede demostrar que la energía libre por unidad de longitud (ε) del vórtice está dada por [Tinkham, 1996]

$$\varepsilon = \left(\frac{\Phi_0}{2\pi\lambda_L} \right)^2 \ln \left(\frac{\lambda_L}{\xi} \right). \quad (4.34)$$

Nótese que ε es una función cuadrática del flujo. Si tuviéramos una situación en la que el flujo fuera $2\Phi_0$, sería preferente tener dos filamentos de flujo Φ_0 con energía total 2ε que un filamento de doble flujo con energía 4ε , lo cual justifica la elección de Φ_0 como el valor mínimo del flujo, es decir, el cuanto de flujo.

4.2 Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes en el Modelo de Hubbard

En presencia de un campo electromagnético el hamiltoniano (H) clásico de una partícula cargada está dado por [Saxon, 1968]

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\Phi + V, \quad (4.35)$$

donde V es el potencial del sistema sin campo electromagnético, \mathbf{A} y Φ son respectivamente el potencial vectorial y escalar relacionados con los campos magnético (\mathbf{B}) y eléctrico (\mathbf{E}) por

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (4.36)$$

y

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}. \quad (4.37)$$

Las ecuaciones de Hamilton en la mecánica clásica son

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (4.38)$$

y

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}, \quad (4.39)$$

las cuales conducen a las ecuaciones de movimiento correctas dadas por

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = e \mathbf{E} + \frac{e}{c} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \nabla V. \quad (4.40)$$

• Teoría de Norma

Los potenciales electromagnéticos no se encuentran completamente definidos por las ecuaciones (4.36) y (4.37). Las transformaciones que dejan invariables a los campos se denominan transformaciones de norma, las cuales pueden ser generadas por una función escalar arbitraria (χ) de acuerdo con

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} - \nabla\chi \quad \text{y} \quad \tilde{\Phi} = \Phi + \frac{1}{c} \frac{\partial\chi}{\partial t}. \quad (4.41)$$

La selección de χ determina la norma y ningún resultado físico debe depender de la elección de χ .

En la mecánica cuántica, el hamiltoniano (4.35) conduce a la ecuación de Schrödinger dada por

$$\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2 \psi + (e\Phi + V)\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t}. \quad (4.42)$$

Como la física debe ser invariante ante las transformaciones de norma (4.41), usando los potenciales $\tilde{\mathbf{A}}$ y $\tilde{\Phi}$ la ecuación (4.42) puede reescribirse como

$$\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - e\tilde{\mathbf{A}}/c)^2 \tilde{\psi} + (e\tilde{\Phi} + V)\tilde{\psi} = i\hbar \frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t}, \quad (4.43)$$

donde $\tilde{\psi}$ es la función de onda transformada. Sustituyendo (4.41) en (4.43) llegamos a

$$\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c} + \frac{e\nabla\chi}{c} \right)^2 \tilde{\psi} + \left(e\Phi + \frac{e}{c} \frac{\partial\chi}{\partial t} + V \right) \tilde{\psi} = i\hbar \frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t}. \quad (4.44)$$

A continuación se prueba que la nueva función de onda dada por

$$\tilde{\psi} = \psi \exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right), \quad (4.45)$$

es una solución de la ecuación (4.44). Dado que

$$\begin{aligned}
\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c} + \frac{e\nabla\chi}{c}\right)\tilde{\psi} &= \left(-i\hbar\nabla - \frac{e\mathbf{A}}{c} + \frac{e\nabla\chi}{c}\right)\psi \exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right) \\
&= -i\hbar \exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right)\nabla\psi - \psi \frac{e}{c}\nabla\chi \exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right) + \left(-\frac{e\mathbf{A}}{c} + \frac{e\nabla\chi}{c}\right)\psi \exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right), \\
&= \exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right)\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c}\right)\psi,
\end{aligned} \tag{4.46}$$

entonces

$$\begin{aligned}
\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c} + \frac{e\nabla\chi}{c}\right)^2\tilde{\psi} &= \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c} + \frac{e\nabla\chi}{c}\right)\exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right)\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c}\right)\psi \\
&= \exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right)\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2\psi.
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Por otro lado,

$$\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t} = \exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right)\frac{\partial\psi}{\partial t} - \psi \frac{ie}{\hbar c}\exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right)\frac{\partial\chi}{\partial t}, \tag{4.48}$$

por lo que usando (4.47) y (4.42) se tiene que

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c} + \frac{e\nabla\chi}{c}\right)^2\tilde{\psi} + \left(e\Phi + \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t} + V\right)\tilde{\psi} \\
= \frac{1}{2m}\exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right)\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2\psi + \exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right)\left(e\Phi + \frac{e}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t} + V\right)\psi \\
= \exp\left(-\frac{ie\chi}{\hbar c}\right)\left[i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{e}{c}\psi\frac{\partial\chi}{\partial t}\right] = i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t},
\end{aligned} \tag{4.49}$$

es decir, una transformación de norma conduce a un cambio de fase en la función de onda.

En el caso de un campo magnético estático sin campo eléctrico, la ecuación (4.41) conduce a $\tilde{\Phi} = \Phi + \frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t} = 0$ y podemos escoger una transformación de norma independiente del tiempo de tal forma que

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \nabla\chi(\mathbf{r}), \tag{4.50}$$

lo cual nos lleva a

$$\chi(\mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r}_0) + \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}'), \tag{4.51}$$

donde \mathbf{r}_0 es un punto fijo arbitrario. Así, la ecuación (4.44) puede reescribirse como

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r})\right]\tilde{\psi} = i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t}, \tag{4.52}$$

donde $\tilde{\psi} = \psi \exp[-ie\chi(\mathbf{r})/\hbar c]$. Nótese que la dependencia del campo magnético queda totalmente absorbida por la función de onda, dejando al hamiltoniano del sistema sin cambio.

Para el hamiltoniano de Hubbard generalizado en presencia de un campo magnético estático, la integral de salto de la ecuación (1.84) se modifica a

$$t_{i,j} = \int d^3r \tilde{\varphi}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \tilde{\varphi}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (4.53)$$

donde

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \exp \left[-\frac{ie\chi(\mathbf{r})}{\hbar c} \right], \quad (4.54)$$

siendo $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ las funciones de Wannier. Dado que $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ están localizadas alrededor de \mathbf{R}_j y que el potencial vectorial no tiene una variación importante en la escala atómica, se puede hacer la siguiente aproximación

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \approx \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \exp \left[-\frac{ie\chi(\mathbf{R}_j)}{\hbar c} \right], \quad (4.55)$$

la cual conduce a

$$\begin{aligned} t_{i,j} &= \exp \left\{ -\frac{ie}{\hbar c} [\chi(\mathbf{R}_j) - \chi(\mathbf{R}_i)] \right\} \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \\ &= t_{i,j}^{(0)} \exp \left(-i \frac{e}{\hbar c} \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_j} d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right), \end{aligned} \quad (4.56)$$

donde

$$t_{i,j}^{(0)} \equiv \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (4.57)$$

es la integral de salto sin campo magnético aplicado. En resumen, la aplicación de campo magnético introduce una fase al parámetro de integral de salto, cuya magnitud se determina integrando el potencial vectorial entre los puntos de salto.

• Transformación de Bogoliubov en el Espacio Real

En la sección 1.1 hemos visto la transformación de Bogoliubov en el espacio recíproco, la cual conduce a la ecuación de BCS para temperatura finita. Así mismo, en la sección 1.2, mediante la transformación de Bogoliubov-de Gennes (BdG) en el espacio real obtuvimos las ecuaciones de BdG. En esta sección aplicamos la transformación de BdG al hamiltoniano de Hubbard generalizado siguiendo el camino original de Bogoliubov discutido en la sección 1.1.

Haciendo la aproximación de campo medio del Apéndice B, el hamiltoniano \hat{H} de la ecuación (3.1) -incluyendo el operador de número (\hat{N}) y el potencial químico (μ) dado que el número de pares no es fijo- puede escribirse de la forma

$$\hat{H} - \mu\hat{N} = \hat{H}_t + \hat{H}_v + \hat{H}_\mu + \hat{H}_U + \hat{H}_V + \hat{H}_{\Delta_t} + \hat{H}_{\Delta_s}, \quad (4.58)$$

donde

$$\hat{H}_t = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma}, \quad (4.59)$$

$$\hat{H}_U = \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t'_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma}, \quad (4.60)$$

$$\hat{H}_\mu = -\mu \sum_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}, \quad (4.61)$$

$$\hat{H}_U \approx U \sum_i \left[-n_{ii^\uparrow} n_{ii^\downarrow} + n_{ii^\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} + n_{ii^\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \right] + U \sum_i \left[-\Lambda_{ii}^* \Lambda_{ii} + \Lambda_{ii}^* \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} + \Lambda_{ii} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right], \quad (4.62)$$

$$\hat{H}_V \approx V \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-n_{ii^\uparrow} n_{jj^\downarrow} + n_{jj^\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} + n_{jj^\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \right] + V \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-\Lambda_{ij}^* \Lambda_{ji} + \Lambda_{ij}^* \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} + \Lambda_{ji} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \right], \quad (4.63)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Delta t} \approx & \Delta t \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \left[-n_{ij\sigma} (n_{ii-\sigma} + n_{jj-\sigma}) + (n_{ij-\sigma} + n_{ji-\sigma}) \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} + (n_{ii-\sigma} + n_{jj-\sigma}) \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] \\ & + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-2\Lambda_{ii}^* \Lambda_{ij} + \Lambda_{ii}^* (\hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} - \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow}) + \Lambda_{ij} (\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger) \right] \\ & + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-2\Lambda_{ij}^* \Lambda_{jj} + \Lambda_{jj} (\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger) + \Lambda_{ij}^* (\hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} - \hat{c}_{j,\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow}) \right] \end{aligned} \quad (4.64)$$

y

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Delta t_3} \approx & \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle\langle i,l \rangle\rangle, \langle\langle j,l \rangle\rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} \left[-n_{ij\sigma} n_{ll-\sigma} + n_{ij-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma} + n_{ll-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] \\ & + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle\langle i,l \rangle\rangle, \langle\langle j,l \rangle\rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle}} \left[-2\Lambda_{il}^* \Lambda_{jl} + \Lambda_{il}^* (\hat{c}_{l,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} - \hat{c}_{l,\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow}) + \Lambda_{lj} (\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{l,\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{l,\uparrow}^\dagger) \right]. \end{aligned} \quad (4.65)$$

siendo

$$n_{ij\sigma} \equiv \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle, \quad (4.66)$$

$$\Lambda_{ij} \equiv \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \rangle = -\langle \hat{c}_{j,\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow} \rangle \quad \text{y} \quad \Lambda_{ij}^* \equiv \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \rangle = -\langle \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \rangle. \quad (4.67)$$

En similitud con la sección 1.2, la transformación de Bogoliubov-de Gennes puede escribirse como

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\uparrow} &= \sum_\alpha (u_i^\alpha \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow} - v_i^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger) & \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger &= \sum_\alpha (u_i^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger - v_i^\alpha \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}) \\ \hat{c}_{i,\downarrow} &= \sum_\alpha (u_i^\alpha \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} + v_i^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger) & \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger &= \sum_\alpha (u_i^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow}^\dagger + v_i^\alpha \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}) \end{aligned} \quad (4.68)$$

donde α es el número cuántico de las nuevas excitaciones que diagonalizan el hamiltoniano (4.58) llamadas Bogolones. Con dicha transformación podemos expresar los operadores de una y dos partículas como [ver Apéndice A]

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} &= \sum_{\alpha,\alpha'} (v_i^\alpha v_j^{\alpha'*} \delta_{\alpha,\alpha'} + u_i^{\alpha*} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma} - v_i^\alpha v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}) \\ & \mp \sum_{\alpha,\alpha'} (u_i^{\alpha*} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}^\dagger + v_i^\alpha u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}) \end{aligned} \quad (4.69)$$

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma} &= \pm \sum_{\alpha,\alpha'} (u_i^\alpha v_j^{\alpha'*} \delta_{\alpha,\alpha'} - u_i^\alpha v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} - v_i^{\alpha*} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}) \\ & + \sum_{\alpha,\alpha'} (u_i^\alpha u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} - v_i^{\alpha*} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^\dagger) \end{aligned} \quad (4.70)$$

donde el signo superior e inferior corresponden a $\sigma = \uparrow$ y \downarrow , respectivamente. Sustituyendo (4.69) y (4.70) en (4.58) obtenemos

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = E_0 + \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = E_0 + \hat{H}_0 + \hat{H}_{1\uparrow} + \hat{H}_{1\downarrow}, \quad (4.71)$$

donde E_0 , \hat{H}_0 y \hat{H}_1 son la parte constante, diagonal y no diagonal dadas por

$$\begin{aligned}
E_0 = & 2 \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} t_{i,j} v_i^\alpha v_j^{\alpha*} + 2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \alpha} t'_{i,j} v_i^\alpha v_j^{\alpha*} - 2\mu \sum_{i, \alpha} v_i^\alpha v_i^{\alpha*} \\
& + U \sum_i \left[-n_{ii\uparrow} n_{ii\downarrow} + \sum_\alpha (n_{ii\uparrow} + n_{ii\downarrow}) v_i^\alpha v_i^{\alpha*} - \Lambda_{ii}^* \Lambda_{ii} - \sum_\alpha \Lambda_{ii}^* u_i^\alpha v_i^{\alpha*} - \sum_\alpha \Lambda_{ii} v_i^\alpha u_i^{\alpha*} \right] \\
& + V \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-n_{ii\uparrow} n_{jj\downarrow} + \sum_\alpha (n_{jj\uparrow} + n_{jj\downarrow}) v_i^\alpha v_j^{\alpha*} \right] \\
& + V \sum_{\langle i,j \rangle} \left(-\Lambda_{ij}^* \Lambda_{ji} - \Lambda_{ij}^* \sum_\alpha u_j^\alpha v_i^{\alpha*} - \sum_\alpha \Lambda_{ji} v_i^\alpha u_j^{\alpha*} \right) \\
& + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left[-n_{ij\sigma} (n_{ii-\sigma} + n_{jj-\sigma}) + (n_{ij-\sigma} + n_{ji-\sigma}) v_i^\alpha v_i^{\alpha*} + (n_{ii-\sigma} + n_{jj-\sigma}) v_i^\alpha v_j^{\alpha*} \right] \\
& - 2\Delta t \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\Lambda_{ii}^* \Lambda_{ij} + \Lambda_{ij}^* \Lambda_{jj} \right] \\
& + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma, \alpha}} (-n_{ij\sigma} n_{ll-\sigma} + n_{ij-\sigma} v_l^\alpha v_l^{\alpha*} + n_{ll-\sigma} v_i^\alpha v_j^{\alpha*}) - 2\Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle}} \Lambda_{il}^* \Lambda_{jl} \\
\hat{H}_0 = & \sum_{\alpha, \sigma} \left[\sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} (u_i^{\alpha*} u_j^\alpha - v_i^\alpha v_j^{\alpha*}) + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} t'_{i,j} (u_i^{\alpha*} u_j^\alpha - v_i^\alpha v_j^{\alpha*}) - \mu \sum_i (u_i^{\alpha*} u_i^\alpha - v_i^\alpha v_i^{\alpha*}) \right] \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma} \\
& + U \sum_{\alpha, \sigma, i} (n_{ii-\sigma} u_i^{\alpha*} u_i^\alpha - n_{ii\sigma} v_i^\alpha v_i^{\alpha*} + \Lambda_{ii}^* u_i^\alpha v_i^{\alpha*} + \Lambda_{ii} v_i^\alpha u_i^{\alpha*}) \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma} \\
& + V \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma, \alpha} (n_{jj-\sigma} u_i^{\alpha*} u_i^\alpha - n_{jj\sigma} v_i^\alpha v_i^{\alpha*} + \Lambda_{ij}^* v_j^{\alpha*} u_i^\alpha + \Lambda_{ji} u_i^{\alpha*} v_j^\alpha) \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma} \\
& + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma, \alpha} \left[(n_{ij-\sigma} + n_{ji-\sigma}) u_i^{\alpha*} u_i^\alpha - (n_{ij\sigma} + n_{ji\sigma}) v_i^\alpha v_i^{\alpha*} \right] \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma} \\
& + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma, \alpha} \left[(n_{ii-\sigma} + n_{jj-\sigma}) u_i^{\alpha*} u_j^\alpha - (n_{ii\sigma} + n_{jj\sigma}) v_i^\alpha v_j^{\alpha*} \right] \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma} \\
& + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma, \alpha} \left[\Lambda_{jj} (u_i^{\alpha*} v_j^\alpha + v_i^\alpha u_j^{\alpha*}) + \Lambda_{ii}^* (u_j^\alpha v_i^{\alpha*} + u_i^\alpha v_j^{\alpha*}) \right] \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma} \\
& + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma, \alpha} \left[\Lambda_{ij} (u_i^{\alpha*} v_i^\alpha + v_i^\alpha u_i^{\alpha*}) + \Lambda_{ij}^* (u_j^\alpha v_j^{\alpha*} + u_j^{\alpha*} v_j^\alpha) \right] \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma} \\
& + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma, \alpha}} \left[(n_{ij-\sigma} u_l^{\alpha*} v_l^\alpha + n_{ij\sigma} v_l^\alpha u_l^{\alpha*}) + (n_{ll-\sigma} u_i^{\alpha*} v_j^\alpha + n_{ll\sigma} v_i^\alpha u_j^{\alpha*}) \right] \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma} \\
& + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma, \alpha}} \left[\Lambda_{lj} (u_i^{\alpha*} v_l^\alpha + u_l^{\alpha*} v_i^\alpha) + \Lambda_{il}^* (u_j^\alpha v_l^{\alpha*} + u_l^\alpha v_j^{\alpha*}) \right] \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha, \sigma}
\end{aligned} \quad (4.73)$$

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{1\uparrow} = & \sum_{\alpha,\alpha'} \left[-\sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} (u_i^{\alpha*} v_j^{\alpha'} + u_i^{\alpha'} v_j^{\alpha*}) - \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} t'_{i,j} (u_i^{\alpha*} v_j^{\alpha'} + u_i^{\alpha'} v_j^{\alpha*}) + \mu \sum_i (u_i^{\alpha*} v_i^{\alpha'} + u_i^{\alpha'} v_i^{\alpha*}) \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow}^\dagger \\
& + U \sum_{i,\alpha,\alpha'} \left[-(n_{ii\downarrow} u_i^{\alpha*} v_i^{\alpha'} + n_{ii\uparrow} u_i^{\alpha'} v_i^{\alpha*}) + \Lambda_{ii} u_i^{\alpha*} u_i^{\alpha'} - \Lambda_{ii}^* v_i^{\alpha*} v_i^{\alpha'} \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow}^\dagger \\
& + V \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha, \alpha'} \left[-(n_{jj\downarrow} u_i^{\alpha*} v_j^{\alpha'} + n_{jj\uparrow} u_i^{\alpha'} v_j^{\alpha*}) + \Lambda_{ji} u_i^{\alpha*} u_j^{\alpha'} - \Lambda_{ij}^* v_j^{\alpha*} v_i^{\alpha'} \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow}^\dagger \\
& - \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha, \alpha'} \left[(n_{ij\downarrow} + n_{ji\downarrow}) (u_i^{\alpha*} v_i^{\alpha'} + u_i^{\alpha'} v_i^{\alpha*}) + (n_{ii\downarrow} + n_{jj\downarrow}) (u_i^{\alpha*} v_j^{\alpha'} + u_i^{\alpha'} v_j^{\alpha*}) \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow}^\dagger \\
& + \Delta t \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[(\Lambda_{jj} + \Lambda_{ii}) u_i^{\alpha*} u_j^{\alpha'} - (\Lambda_{ii}^* + \Lambda_{jj}^*) v_i^{\alpha*} v_j^{\alpha'} + 2\Lambda_{ij} u_i^{\alpha*} u_j^{\alpha'} - 2\Lambda_{ij}^* v_j^{\alpha*} v_i^{\alpha'} \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow}^\dagger \\
& - \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle}} \left[n_{ij\downarrow} (u_l^{\alpha*} v_l^{\alpha'} + u_l^{\alpha'} v_l^{\alpha*}) + n_{ll\downarrow} (u_i^{\alpha*} v_j^{\alpha'} + u_i^{\alpha'} v_j^{\alpha*}) \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow}^\dagger \\
& + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \alpha, \alpha'}} \left[(\Lambda_{lj} + \Lambda_{jl}) u_i^{\alpha*} u_l^{\alpha'} - (\Lambda_{il}^* + \Lambda_{li}^*) v_l^{\alpha*} v_j^{\alpha'} \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\downarrow}^\dagger
\end{aligned} \tag{4.74}$$

y

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{1\downarrow} = & \sum_{\alpha,\alpha'} \left[-\sum_{\langle i,j \rangle} t_{i,j} (v_i^\alpha u_j^{\alpha'} + v_i^{\alpha'} u_j^\alpha) - \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} t'_{i,j} (v_i^\alpha u_j^{\alpha'} + v_i^{\alpha'} u_j^\alpha) + \mu \sum_i (v_i^\alpha u_i^{\alpha'} + v_i^{\alpha'} u_i^\alpha) \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} \\
& + U \sum_{i,\alpha,\alpha'} \left[-(n_{ii\uparrow} u_i^\alpha v_i^{\alpha'} + n_{ii\downarrow} u_i^{\alpha'} v_i^\alpha) + \Lambda_{ii}^* u_i^\alpha u_i^{\alpha'} - \Lambda_{ii} v_i^\alpha v_i^{\alpha'} \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} \\
& + V \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha, \alpha'} \left[-(n_{jj\uparrow} u_i^\alpha v_j^{\alpha'} + n_{jj\downarrow} u_i^{\alpha'} v_j^\alpha) + \Lambda_{ij}^* u_j^\alpha u_i^{\alpha'} - \Lambda_{ji} v_i^\alpha v_j^{\alpha'} \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} \\
& - \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha, \alpha'} \left[(n_{ij\downarrow} + n_{ji\downarrow}) (u_i^\alpha v_i^{\alpha'} + u_i^{\alpha'} v_i^\alpha) + (n_{ii\downarrow} + n_{jj\downarrow}) (u_i^\alpha v_j^{\alpha'} + u_i^{\alpha'} v_j^\alpha) \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} \\
& + \Delta t \sum_{\alpha, \alpha'} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[(\Lambda_{ii}^* + \Lambda_{jj}^*) u_i^\alpha u_j^{\alpha'} - (\Lambda_{jj} + \Lambda_{ii}) v_i^\alpha v_j^{\alpha'} + 2\Lambda_{ij}^* u_j^\alpha u_i^{\alpha'} - 2\Lambda_{ij} v_i^\alpha v_j^{\alpha'} \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} \\
& - \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \alpha, \alpha'}} \left[n_{ij\downarrow} (u_l^\alpha v_l^{\alpha'} + u_l^{\alpha'} v_l^\alpha) + n_{ll\downarrow} (u_i^\alpha v_j^{\alpha'} + u_i^{\alpha'} v_j^\alpha) \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow} \\
& + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \alpha, \alpha'}} \left[(\Lambda_{il}^* + \Lambda_{li}^*) u_l^\alpha u_j^{\alpha'} - (\Lambda_{lj} + \Lambda_{jl}) v_i^\alpha v_l^{\alpha'} \right] \hat{\gamma}_{\alpha,\downarrow} \hat{\gamma}_{\alpha',\uparrow}.
\end{aligned} \tag{4.75}$$

Dado que el propósito de la transformación de BdG es diagonalizar el hamiltoniano dando

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = E_0 + \sum_{\alpha,\sigma} E^\alpha \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}, \tag{4.76}$$

los coeficientes de $\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}$ en (4.73) deben ser iguales a la energía de excitación E^α , lo cual nos lleva a las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes para el hamiltoniano de Hubbard generalizado.

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H} & \Delta \\ \Delta^* & -\mathbf{H}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}^\alpha \\ \mathbf{v}^\alpha \end{pmatrix} = E^\alpha \begin{pmatrix} \mathbf{u}^\alpha \\ \mathbf{v}^\alpha \end{pmatrix}, \tag{4.77}$$

donde los elementos de las submatrices para $i \neq j$ son

$$H_{i,i} = -\mu + U n_{ii-\sigma} + V \sum_{j \neq i} n_{jj-\sigma} + \Delta t \sum_j (n_{ij-\sigma} + n_{ji-\sigma}) + \Delta t_3 \sum_{\langle\langle j,l \rangle\rangle} n_{lj-\sigma}, \quad (4.78)$$

$$H_{i,i}^* = -\mu + U n_{ii\sigma} + V \sum_{j \neq i} n_{jj\sigma} + \Delta t \sum_j (n_{ij\sigma} + n_{ji\sigma}) + \Delta t_3 \sum_{\langle\langle j,l \rangle\rangle} n_{lj\sigma},$$

$$H_{i,j} = t_{i,j} + t'_{i,j} + \Delta t (n_{ii-\sigma} + n_{jj-\sigma}) + \Delta t_3 \sum_l n_{ll-\sigma}, \quad (4.79)$$

$$H_{i,j}^* = t_{i,j}^* + t'_{i,j}^* + \Delta t (n_{ii\sigma} + n_{jj\sigma}) + \Delta t_3 \sum_l n_{ll\sigma},$$

$$\Delta_{i,i} = U \Lambda_{ii} + 2\Delta t \sum_j \Lambda_{i,j} \quad (4.80)$$

y

$$\Delta_{i,j} = V \Lambda_{ji} + \Delta t (\Lambda_{ii} + \Lambda_{jj}) + \Delta t_3 \left(\sum_l \Lambda_{il} + \sum_{l'} \Lambda_{jl'} \right). \quad (4.81)$$

En las ecuaciones (4.78) y (4.80), i y j son primeros vecinos, l es primer vecino de i y segundo vecino de j . En la ecuación (4.79), i y j son primeros vecinos en los términos de $t_{i,j}$ y Δt y son segundos vecinos entre sí y primeros vecinos de l en los términos de $t'_{i,j}$ y Δt_3 . Para la ecuación (4.81) i y j son primeros vecinos, l es primer vecino de i y segundo vecino de j , l' es primer vecino de j y segundo vecino de i .

Aplicando la transformación de Bogoliubov-de Gennes (4.68) a las ecuaciones (4.67) obtenemos [ver Apéndice A]

$$n_{ij\sigma} = \sum_{\alpha} \left\{ u_i^{\alpha*} u_j^{\alpha} f(E^{\alpha}) + v_i^{\alpha} v_j^{\alpha*} [1 - f(E^{\alpha})] \right\} \quad (4.82)$$

y

$$\Lambda_{i,j} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha} (u_i^{\alpha} v_j^{\alpha*} + u_j^{\alpha} v_i^{\alpha*}) \tanh \left(\frac{E^{\alpha}}{k_B T} \right). \quad (4.83)$$

• Formalismo de Superceldas

Para un sólido macroscópico, requerimos el espacio recíproco y una celda unitaria con múltiples grados de libertad, llamada supercelda, con el fin de poder analizar la variación espacial de los vórtices. Si tomamos una celda unitaria de $N = N_x \times N_y$ sitios, las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes deben tener condiciones de frontera periódicas, por lo cual aplicando el teorema de Bloch la solución de las ecuaciones (4.77) debe cumplir [Han, 2010]

$$\begin{pmatrix} u_j^{\alpha} \\ v_j^{\alpha} \end{pmatrix} \Rightarrow e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \begin{pmatrix} u_j^{\alpha}(\mathbf{k}) \\ v_j^{\alpha}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.84)$$

Sustituyendo (4.84) en (4.77), las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes para una celda unitaria de $N_x \times N_y$ sitios queda como

$$\sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} \begin{pmatrix} H_{i,j} & \Delta_{i,j} \\ \Delta_{i,j}^* & -H_{i,j}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_j^{\alpha}(\mathbf{k}) \\ v_j^{\alpha}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E^{\alpha}(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} u_i^{\alpha}(\mathbf{k}) \\ v_i^{\alpha}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (4.85)$$

donde $H_{i,j}$ y $\Lambda_{i,j}$ son elementos de matrices de $N \times N$. De las ecuaciones (4.83) y (4.84) obtenemos

$$n_{ij} = \sum_{\alpha, \mathbf{k}} \left\{ u_i^{\alpha*}(\mathbf{k}) u_j^\alpha(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} f[E^\alpha(\mathbf{k})] + v_i^\alpha(\mathbf{k}) v_j^{\alpha*}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} (1 - f[E^\alpha(\mathbf{k})]) \right\} \quad (4.86)$$

y

$$\Lambda_{ij} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \mathbf{k}} \left[u_i^\alpha(\mathbf{k}) v_j^{\alpha*}(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} + u_j^\alpha(\mathbf{k}) v_i^{\alpha*}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} \right] \tanh\left(\frac{E^\alpha(\mathbf{k})}{k_B T}\right), \quad (4.87)$$

donde se toman todos los posibles estados α y \mathbf{k} .

4.3 Brecha Superconductora Local

Las ecuaciones de BdG para el modelo de Hubbard generalizado (4.85) se resuelven de manera autoconsistente usando la ecuación (4.87), es decir, proponiendo una solución inicial de las brechas locales y diagonalizando la matriz (4.85) para determinar $[u_j^\alpha(\mathbf{k}), v_j^\alpha(\mathbf{k})]$, así se obtienen nuevas brechas locales. Este proceso se repite tantas veces sea necesario, hasta que los elementos de matriz (4.81) converjan satisfactoriamente.

En la sección 4.1 discutimos la existencia de un estado mixto en los superconductores tipo II, donde las líneas de campo magnético penetran al material con un flujo $\Phi = n\Phi_0$. Por lo tanto, se puede escoger una celda tal que la intensidad del campo magnético aplicado conduce a uno o dos flujos cuantizados Φ_0 en dicha celda. Si tomamos una celda de tamaño $N_x a \times N_x a$, el campo necesario para tener un vórtice en ella tendría que ser

$$B = \frac{\Phi_0}{N_x^2 a^2}. \quad (4.88)$$

Usando la norma simétrica $\mathbf{A} = \mathbf{B} \times \mathbf{r}/2 = (-By, Bx, 0)/2$, la integral de salto (4.56) entre primeros vecinos $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ y $\mathbf{r}_j = (x_j, y_j)$ toma la siguiente forma

$$t_{i,j} = \begin{cases} t \exp(\mp i \pi x_i), & \text{si } x_i = x_j, y_i = y_j \pm a \\ t \exp(\pm i \pi y_i), & \text{si } x_i = x_j \pm a, y_i = y_j \end{cases}, \quad (4.89)$$

donde $\alpha \equiv Ba^2/\Phi_0 = 1/N_x^2$ denota la razón de flujo magnético.

Cabe mencionar que la longitud de penetración (λ_L) dada por la ecuación (1.4) para el caso de banda semillena con $n_s = 1/a^3$ es aproximadamente 425.8 \AA para $a = 4 \text{ \AA}$. Por otro lado, dentro de la teoría BCS la longitud de coherencia a temperatura cero (ξ_0) está dada por [Tinkham, 1996] $\xi_0 = \hbar v_F / \pi \Delta(0)$. Para el caso de una red cuadrada con integrales de salto a primeros vecinos (t), la velocidad de grupo es

$$v \equiv \frac{1}{\hbar} |\nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon| = \frac{2|t|a}{\hbar} \sqrt{\sin^2(k_x a) + \sin^2(k_y a)}, \quad (4.90)$$

cuyo máximo valor sobre la superficie de Fermi para una banda semillena es $v_F^{\max} = 2\sqrt{2}|t|a/\hbar$. Además, para $U = -2|t|$ y una banda semillena se tiene $\Delta(0) \approx 0.376|t|$ (ver Fig. 4.6). Entonces $\xi_0 \approx 9.58 \text{ \AA}$, por lo que de la ecuación (4.15) obtenemos $\kappa = \lambda_L/\xi_0 \approx 44.5 \gg 1/\sqrt{2}$, es decir, un estado superconductor de tipo II. Así mismo, dentro del formalismo de Ginzburg-Landau el campo magnético crítico superior a temperatura cero es [Tinkham, 1996] $H_{c2} = \Phi_0/(2\pi\xi_0^2) \approx 359$ Teslas y el campo magnético crítico inferior es [Tinkham, 1996] $H_{c1} \approx \Phi_0 \ln \kappa / (4\pi\lambda^2) \approx 0.345$ Teslas.

En la Fig. 4.5 se muestra la brecha local del sitios j , $|\Delta_{j,j}|$, en una celda de 28×28 sitios que contiene dos vórtices para una interacción electrón-electrón atractiva de $U = -2|t|$ con el fin de mantener el estado superconductor en un campo magnético $B = 2\Phi_0/28^2 a^2 \approx 33.0$ Teslas para $a \approx 4 \text{ \AA}$. Nótese que dichos vórtices tienen simetría s y en el centro del vórtice la brecha superconductora es cero, ya que el campo magnético penetra al superconductor tipo II cuando el campo magnético aplicado se encuentra entre H_{c1} y H_{c2} , como discutimos en el párrafo anterior. Además, existe otro centro de vórtice en las esquinas de la supercelda.

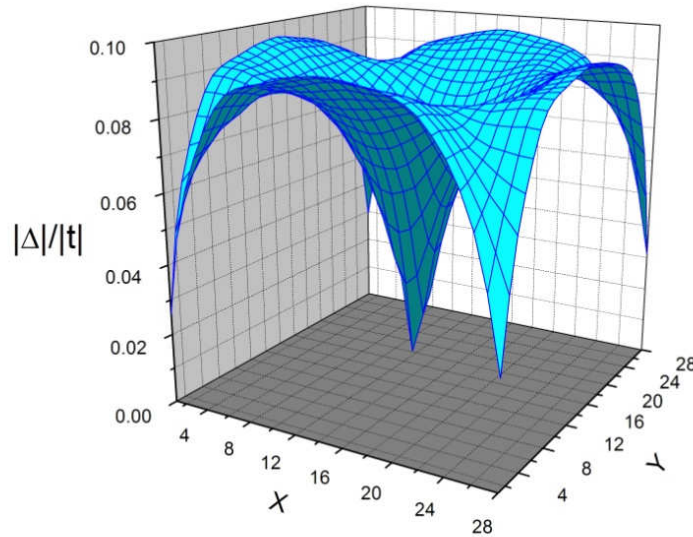


Fig. 4.5 Variación espacial del parámetro de orden (Δ) en una supercelda de 28×28 sitios con $U = -2|t|$, $V = \Delta t = \Delta t_3 = 0$, $\mu = 0.2|t|$ y $B \approx 33$ Teslas para un superconductor tipo II.

En la Fig. 4.6 se muestra la dependencia de la brecha superconductora (Δ), definida en el formalismo de BdG como el máximo valor de $|\Delta_{j,j}|$, como función de la densidad de portadores (n) para distintas intensidades de campo magnético aplicado (B). Obsérvese que Δ disminuye al aumentar B , excepto $n = 1$. Esta invariancia de Δ podría relacionarse con la singularidad de van Hove en el caso de banda semillena, donde la densidad de estados al nivel de Fermi diverge.

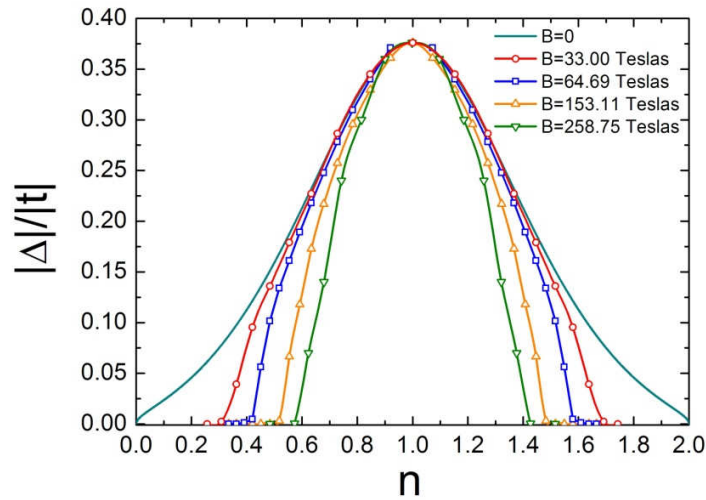


Fig. 4.6 Brecha superconductor (Δ) como función de la densidad de portadores (n) para distintas intensidades de campo magnético (B) indicadas en la figura.

Al diagonalizar la ecuación (4.85) se obtienen las energías de excitación $E^\alpha(\mathbf{k})$ y se calcula la entropía (S) dada por

$$S = -2k_B \sum_{\alpha, \mathbf{k}} \left[(1 - f[E^\alpha(\mathbf{k})]) \ln(1 - f[E^\alpha(\mathbf{k})]) + f[E^\alpha(\mathbf{k})] \ln(f[E^\alpha(\mathbf{k})]) \right], \quad (4.91)$$

donde f es la distribución de Fermi-Dirac y k_B la constante de Boltzmann. De la ecuación (4.91) obtenemos el calor específico electrónico

$$c_{el} = \frac{T}{N_s} \frac{dS}{dT}. \quad (4.92)$$

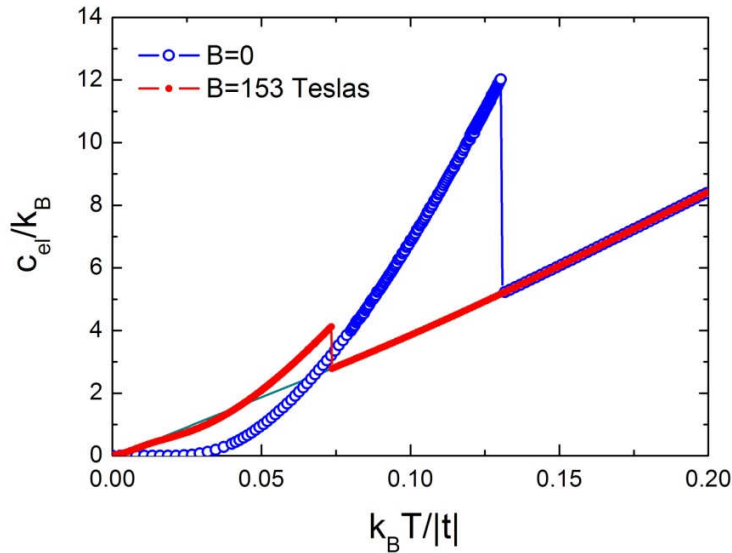


Fig. 4.7 Calor específico electrónico (c_{el}) como función de la temperatura (T) en ausencia de campo magnético aplicado (círculos abiertos azules) y con un campo magnético de 153 Teslas (círculos sólidos rojos).

Con la ecuación (4.92) calculamos numéricamente c_{el} como función de la temperatura (T) cuyos resultados se muestran en la Fig. 4.7. Nótese que para T mayor que la temperatura crítica (T_c) el calor específico electrónico tiene una variación lineal con la temperatura y en T_c existe una discontinuidad en c_{el} tanto en ausencia como en presencia de campo magnético aplicado. Sin embargo, la magnitud de dicha discontinuidad disminuye con el aumento del campo, como se observa en $\text{Nb}_{0.77}\text{Zr}_{0.23}$ [Mirmelstein, 1997] a pesar del comportamiento electrónico tridimensionalidad en este compuesto. Por debajo de T_c observamos una variación exponencial cuando $B = 0$ y una variación de potencias cuando $B > 0$.

Conclusiones

Esta tesis aborda la superconductividad anisotrópica a partir del modelo de Hubbard generalizado incluyendo las interacciones carga-enlace dentro del formalismo de BCS con el potencial químico variable, así como el modelo de Hubbard atractivo en el formalismo de Bogoliubov-de Gennes (BdG). Este último establece un formalismo microscópico para estudiar los efectos del campo magnético externo en la superconductividad anisotrópica. Los principales resultados obtenidos pueden resumirse como sigue.

- (1) A partir de los datos experimentales de ARPES y de T_c , hemos determinado los parámetros del modelo de Hubbard generalizado y los resultados teóricos de calor específico electrónico sin parámetros ajustables tienen una buena concordancia con los experimentales.
- (2) El modelo de Hubbard de una sola banda con saltos a primero y segundo vecinos reproduce razonablemente bien la superficie de Fermi medida por los experimentos de ARPES.
- (3) La singularidad de Van Hove parece ser esencial en la determinación de la máxima temperatura crítica cuando el potencial químico coincide con dicha singularidad.
- (4) Se desarrollaron por primera vez las ecuaciones de BdG para las interacciones carga-enlace con el fin de estudiar la superconductividad anisotrópica en campos magnéticos.
- (5) Las primeras soluciones numéricas de las ecuaciones de BdG muestran la estructura espacial de los vórtices con simetría s en el estado mixto de un superconductor tipo II.
- (6) El calor específico electrónico de dichas soluciones confirma que la presencia del campo magnético modifica su comportamiento en consistencia con los resultados experimentales.

En resumen, nuestros resultados muestran que las interacciones carga-enlace que siempre están presentes en materiales reales a pesar de su relativa pequeña magnitud en comparación con las interacciones Coulombianas repulsivas, pueden inducir la superconductividad anisotrópica con valores cuantitativos en buena concordancia con los datos experimentales tanto de $\text{La}_{x-2}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [Galván, 2012] como de $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$ [Pérez, 2013]. Una extensión de dichos resultados a partir de las ecuaciones de BdG muestra la formación de vórtices magnéticos y permite estudiar la termodinámica del estado mixto superconductor. Así mismo, las investigaciones presentadas en esta tesis sugieren que el formalismo de BCS con potencial químico variable e interacción electrón-electrón dependiente de \mathbf{k} pueda ser un medio apropiado para el estudio de la superconductividad anisotrópica. Por otro lado, el formalismo de BdG extiende nuestro análisis a superconductores inhomogéneos así como dispositivos superconductores a pesar de su costo computacional. Cabe mencionar que las soluciones numéricas de las ecuaciones de BdG presentadas en esta tesis son únicamente para simetría s y la parte anisotrópica se encuentra aún en proceso. Por último, quisiera comentar que el desarrollo de la presente tesis me ha enseñado el quehacer de la ciencia moderna, desde la búsqueda bibliográfica, desarrollos analíticos y/o numéricos, comparación con los resultados experimentales y presentación en congresos nacionales e internacionales, hasta el proceso de publicación.

Apéndice A Promedio Térmico de Operadores

En la mecánica estadística cuántica, el promedio sobre el ensamble gran canónico está dado por [Pathria, 1972]

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr} \left[e^{\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{O} \right] / \text{Tr} \left[e^{\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right], \quad (\text{A.1})$$

donde Tr representa la traza y $\beta \equiv 1/k_B T$ siendo k_B la constante de Boltzmann. Basados en (A.1) calcularemos los promedios de las ecuaciones (4.66) y (4.67) en la base de los operadores $\hat{\gamma}$ dados por las transformaciones de Bogoliubov-de Gennes (4.68).

• Promedio de Términos de Una Sola Partícula

Usando las transformaciones (4.68), expresamos los términos de una partícula en el hamiltoniano de Hubbard en función de los Bogolones ($\hat{\gamma}$),

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} &= \sum_{\alpha} (u_i^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \mp v_i^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}) \sum_{\alpha'} (u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma} \mp v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}) \\ &= \sum_{\alpha,\alpha'} (u_i^{\alpha*} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma} \mp u_i^{\alpha*} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} \mp v_i^{\alpha} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma} + v_i^{\alpha} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}^\dagger) \\ &= \sum_{\alpha,\alpha'} (u_i^{\alpha*} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma} + v_i^{\alpha} v_j^{\alpha'*} \delta_{\alpha,\alpha'} - v_i^{\alpha} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma} \mp u_i^{\alpha*} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}^\dagger \mp v_i^{\alpha} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}), \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

donde los signos superior e inferior corresponden respectivamente a $\sigma = \uparrow$ y $\sigma = \downarrow$. Entonces

$$\text{Tr} \left[e^{-(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] = \text{Tr} \left[e^{-(\hat{H} - \mu\hat{N})} \sum_{\alpha,\alpha'} (u_i^{\alpha*} u_j^{\alpha'} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha',\sigma} + v_i^{\alpha} v_j^{\alpha'*} \delta_{\alpha,\alpha'} - v_i^{\alpha} v_j^{\alpha'*} \hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}) \right], \quad (\text{A.3})$$

donde la traza de los términos $\hat{\gamma}^\dagger \hat{\gamma}^\dagger$ y $\hat{\gamma} \hat{\gamma}$ es cero ya que $\hat{H} - \mu\hat{N}$ es diagonal en la base de $\hat{\gamma}$'s. Esto implica que

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] &= \sum_{\alpha} \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} (u_i^{\alpha*} u_j^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} + v_i^{\alpha} v_j^{\alpha*} - v_i^{\alpha} v_j^{\alpha*} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}) \right] \\ &= \sum_{\alpha} \left[u_i^{\alpha*} u_j^{\alpha} \text{Tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}) + v_i^{\alpha} v_j^{\alpha*} \text{Tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}) - v_i^{\alpha} v_j^{\alpha*} \text{Tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

En la base $\prod_{\alpha,\sigma} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger |0\rangle$ el hamiltoniano es diagonal, es decir $\hat{H} - \mu\hat{N} = \sum_{\alpha,\sigma} E^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}$, entonces

[Rickaysen, 1965]

$$\text{Tr}(e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}) = \text{Tr} \left(\prod_{\alpha,\sigma} e^{-\beta E^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}} \right) = \prod_{\alpha,\sigma} \text{Tr}_{\alpha,\sigma} (e^{-\beta E^{\alpha} \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}}) = \prod_{\alpha'} (1 + e^{-\beta E^{\alpha'}})^2, \quad (\text{A.5})$$

donde hemos intercambiado el orden de la suma debido a la traza con el producto. El subíndice α, σ de Tr en la ecuación (A.5) indica que la traza se toma sólo en el espacio de estados para α y σ dadas que son $|0_{\alpha,\sigma}\rangle$ y $|1_{\alpha,\sigma}\rangle$, debido a la naturaleza fermiónica de los Bogolones. Análogamente,

$$\begin{aligned}
Tr(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}) &= Tr\left(\prod_{\alpha',\sigma'}e^{-\beta E^{\alpha'}\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma'}^\dagger\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma'}}\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}\right) \\
&= Tr\left(e^{-\beta E^\alpha\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}}\prod_{\alpha'\neq\alpha\ \text{ó}\ \sigma'\neq\sigma}e^{-\beta E^{\alpha'}\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma'}^\dagger\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma'}}\right) \\
&= Tr_{\alpha,\sigma}\left(e^{-\beta E^\alpha\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}}\right)\prod_{\alpha'\neq\alpha\ \text{ó}\ \sigma'\neq\sigma}Tr_{\alpha',\sigma'}\left(e^{-\beta E^{\alpha'}\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma'}^\dagger\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma'}}\right) \\
&= e^{-\beta E^\alpha}(1+e^{-\beta E^\alpha})\prod_{\alpha'\neq\alpha}(1+e^{-\beta E^{\alpha'}})^2,
\end{aligned} \tag{A.6}$$

donde $Tr_{\alpha,\sigma}\left(e^{-\beta E^\alpha\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^\dagger\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}}\right) = e^{-\beta E^\alpha}$ y el factor $(1+e^{-\beta E^\alpha})$ proviene de $Tr_{\alpha',\sigma'}\left(e^{-\beta E^{\alpha'}\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma'}^\dagger\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma'}}\right)$ cuando $\alpha' = \alpha$ y $\sigma' \neq \sigma$. De esta manera, la ecuación (A.4) queda como

$$\begin{aligned}
Tr\left[e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,\sigma}\right] &= \sum_{\alpha}\left[u_i^{\alpha*}u_j^\alpha e^{-\beta E^\alpha}(1+e^{-\beta E^\alpha})\prod_{\alpha'\neq\alpha}(1+e^{-\beta E^{\alpha'}})^2 + v_i^\alpha v_j^{\alpha*}\prod_{\alpha'}(1+e^{-\beta E^{\alpha'}})^2\right] \\
&\quad - \sum_{\alpha}\left[v_i^\alpha v_j^{\alpha*} e^{-\beta E^\alpha}(1+e^{-\beta E^\alpha})\prod_{\alpha'\neq\alpha}(1+e^{-\beta E^{\alpha'}})^2\right]
\end{aligned} \tag{A.7}$$

Por lo tanto, el promedio de la ecuación (A.2) está dado por

$$\begin{aligned}
\langle\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,\sigma}\rangle &= \frac{\sum_{\alpha}u_i^{\alpha*}u_j^\alpha e^{-\beta E^\alpha}(1+e^{-\beta E^\alpha})\prod_{\alpha'\neq\alpha}(1+e^{-\beta E^{\alpha'}})^2}{\prod_{\alpha''}(1+e^{-\beta E^{\alpha''}})^2} + \frac{\sum_{\alpha}v_i^\alpha v_j^{\alpha*}\prod_{\alpha'}(1+e^{-\beta E^{\alpha'}})^2}{\prod_{\alpha''}(1+e^{-\beta E^{\alpha''}})^2} \\
&\quad - \frac{\sum_{\alpha}v_i^\alpha v_j^{\alpha*} e^{-\beta E^\alpha}(1+e^{-\beta E^\alpha})\prod_{\alpha'\neq\alpha}(1+e^{-\beta E^{\alpha'}})^2}{\prod_{\alpha''}(1+e^{-\beta E^{\alpha''}})^2}.
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Así llegamos a

$$\langle\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,\sigma}\rangle = \sum_{\alpha}\left[\frac{u_i^{\alpha*}u_j^\alpha e^{-\beta E^\alpha}}{1+e^{-\beta E^\alpha}} + v_i^\alpha v_j^{\alpha*} - \frac{v_i^\alpha v_j^{\alpha*} e^{-\beta E^\alpha}}{1+e^{-\beta E^\alpha}}\right] = \sum_{\alpha}\left\{u_i^{\alpha*}u_j^\alpha f(E^\alpha) + v_i^\alpha v_j^{\alpha*} [1-f(E^\alpha)]\right\}, \tag{A.9}$$

donde $f(E^\alpha)$ es la distribución de Fermi-Dirac dada por

$$f(E^\alpha) = \frac{1}{e^{\beta E^\alpha} + 1}. \tag{A.10}$$

Con lo cual obtenemos la ecuación (4.82) dada por

$$n_{ij\sigma} = \langle\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger\hat{c}_{j,\sigma}\rangle = \sum_{\alpha}\left\{u_i^{\alpha*}u_j^\alpha f(E^\alpha) + v_i^\alpha v_j^{\alpha*} [1-f(E^\alpha)]\right\}, \tag{A.11}$$

el cual es independiente de la orientación del espín ya que dentro del hamiltoniano (3.1) la energía de excitación de los Bogolones no depende del espín.

• Promedio de Términos de Dos Partículas

De forma análoga al punto anterior, expresamos el operador de pares en términos de los Bogolones mediante la transformación de Bogoliubov-de Gennes (4.68)

$$\begin{aligned}
\hat{c}_{i,\sigma}\hat{c}_{j,-\sigma} &= \sum_{\alpha} (u_i^{\alpha}\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \mp v_i^{\alpha*}\hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^{\dagger}) \sum_{\alpha'} (u_j^{\alpha'}\hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} \pm v_j^{\alpha'*}\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^{\dagger}) \\
&= \sum_{\alpha,\alpha'} (u_i^{\alpha}u_j^{\alpha'}\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}\hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} \pm u_i^{\alpha}v_j^{\alpha'*}\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^{\dagger} \mp v_i^{\alpha*}u_j^{\alpha'}\hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^{\dagger}\hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} - v_i^{\alpha*}v_j^{\alpha'*}\hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^{\dagger}\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^{\dagger}) \\
&= \sum_{\alpha,\alpha'} (\pm u_i^{\alpha}v_j^{\alpha'*}\delta_{\alpha,\alpha'} \mp u_i^{\alpha}v_j^{\alpha'*}\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^{\dagger}\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \mp v_i^{\alpha*}u_j^{\alpha'}\hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^{\dagger}\hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma} - v_i^{\alpha*}v_j^{\alpha'*}\hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^{\dagger}\hat{\gamma}_{\alpha',\sigma}^{\dagger} + u_i^{\alpha}u_j^{\alpha'}\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}\hat{\gamma}_{\alpha',-\sigma}),
\end{aligned} \tag{A.12}$$

y por lo tanto la traza queda como

$$\begin{aligned}
Tr\left[e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{c}_{i,\sigma}\hat{c}_{j,-\sigma}\right] &= \sum_{\alpha} Tr\left[e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}(\pm u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} \mp u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*}\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^{\dagger}\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma} \mp v_i^{\alpha*}u_j^{\alpha'}\hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^{\dagger}\hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma})\right] \\
&= \sum_{\alpha} \left[\pm u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*}Tr(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}) \mp u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*}Tr(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}^{\dagger}\hat{\gamma}_{\alpha,\sigma}) \mp v_i^{\alpha*}u_j^{\alpha'}Tr(e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma}^{\dagger}\hat{\gamma}_{\alpha,-\sigma})\right] \\
&= \sum_{\alpha} \left[\pm u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} \prod_{\alpha'} (1+e^{-\beta E^{\alpha'}}) \mp u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} e^{-\beta E^{\alpha}} \prod_{\alpha' \neq \alpha} (1+e^{-\beta E^{\alpha'}}) \mp v_i^{\alpha*}u_j^{\alpha'} e^{-\beta E^{\alpha}} \prod_{\alpha' \neq \alpha} (1+e^{-\beta E^{\alpha'}})\right],
\end{aligned} \tag{A.13}$$

donde hemos hecho uso de las ecuaciones (A.5) y (A.6). De la ecuación (A.1)

$$\begin{aligned}
\langle \hat{c}_{i,\sigma}\hat{c}_{j,-\sigma} \rangle &= \frac{\sum_{\alpha} \left[\pm u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} \prod_{\alpha'} (1+e^{-\beta E^{\alpha'}}) \mp u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} e^{-\beta E^{\alpha}} \prod_{\alpha' \neq \alpha} (1+e^{-\beta E^{\alpha'}}) \mp v_i^{\alpha*}u_j^{\alpha'} e^{-\beta E^{\alpha}} \prod_{\alpha' \neq \alpha} (1+e^{-\beta E^{\alpha'}})\right]}{\prod_{\alpha''} (1+e^{-\beta E^{\alpha''}})} \\
&= \sum_{\alpha} \left(\pm u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} \mp \frac{u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} e^{-\beta E^{\alpha}}}{1+e^{-\beta E^{\alpha}}} \mp \frac{v_i^{\alpha*}u_j^{\alpha'} e^{-\beta E^{\alpha}}}{1+e^{-\beta E^{\alpha}}} \right).
\end{aligned} \tag{A.14}$$

Usando la ecuación (A.10) tenemos que

$$\begin{aligned}
\langle \hat{c}_{i,\sigma}\hat{c}_{j,-\sigma} \rangle &= \pm \sum_{\alpha} \left[u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} - u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*}f(E^{\alpha}) - v_i^{\alpha*}u_j^{\alpha'}f(E^{\alpha}) \right] \\
&= \pm \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} + u_j^{\alpha}v_i^{\alpha*} - u_j^{\alpha}v_i^{\alpha*} + u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*}) - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} + v_i^{\alpha*}u_j^{\alpha'}) 2f(E^{\alpha}) \\
&= \pm \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} + u_j^{\alpha}v_i^{\alpha*}) [1 - 2f(E^{\alpha})] \mp \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (u_j^{\alpha}v_i^{\alpha*} - u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*}) \\
&= \pm \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} + u_j^{\alpha}v_i^{\alpha*}) [1 - 2f(E^{\alpha})] = \pm \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} + u_j^{\alpha}v_i^{\alpha*}) \tanh\left(\frac{E^{\alpha}}{2k_B T}\right),
\end{aligned} \tag{A.15}$$

donde hemos usado la propiedad $\sum_{\alpha} (u_j^{\alpha}v_i^{\alpha*} - u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*}) = 0$ ya que la transformación de Bogoliubov-Gennes es unitaria. Por lo tanto,

$$\Lambda_{ij} \equiv \langle \hat{c}_{i,\sigma}\hat{c}_{j,-\sigma} \rangle = \pm \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (u_i^{\alpha}v_j^{\alpha*} + u_j^{\alpha}v_i^{\alpha*}) \tanh\left(\frac{E^{\alpha}}{2k_B T}\right), \tag{A.16}$$

donde los signos + y - corresponden a $\sigma = \uparrow$ y \downarrow respectivamente.

Apéndice B Aproximación de Campo Medio

Los sistemas de muchas partículas interactuantes entre sí constituyen uno de los grandes retos de la física, cuyo estudio se realiza mediante aproximaciones. La aproximación de campo medio consiste en analizar sólo la dinámica de una de las partículas a partir de su interacción con el campo producido por las demás partículas, reduciendo el problema de muchos cuerpos al de uno solo que se resuelve en forma autoconsistente, es decir, se propone una configuración inicial de las partículas y se resuelve la ecuación de Schrödinger de una partícula para generar una nueva configuración. Este proceso se culmina cuando dicha nueva configuración coincida con la propuesta.

Cualquier operador \hat{A} siempre puede expresarse en términos de su valor medio ($\langle \hat{A} \rangle$) más una fluctuación dada por ($\delta \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$), es decir $\hat{A} = \langle \hat{A} \rangle + \delta \hat{A}$. Entonces el producto de dos operadores $\hat{A}\hat{B} = (\langle \hat{A} \rangle + \delta \hat{A})(\langle \hat{B} \rangle + \delta \hat{B}) \approx \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \delta \hat{B} + \delta \hat{A} \langle \hat{B} \rangle = \hat{A} \langle \hat{B} \rangle + \hat{B} \langle \hat{A} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle$ despreciando el término cuadrático de la fluctuación ($\delta \hat{A} \delta \hat{B}$). En este apéndice aplicaremos la aproximación de campo medio a los términos de dos partículas del hamiltoniano ($\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow} \hat{c}_{k,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{l,\downarrow}$), los cuales pueden considerarse como un producto $\hat{A}\hat{B}$ siendo $\hat{A} = \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow}$ y $\hat{B} = \hat{c}_{k,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{l,\downarrow}$ o también $\hat{A} = \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{k,\downarrow}^\dagger$ y $\hat{B} = \hat{c}_{l,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow}$. Finalmente, deduciremos las ecuaciones (4.62)-(4.65).

El hamiltoniano de Hubbard dado por la ecuación (3.1) se puede escribir explícitamente de la forma

$$\begin{aligned} \hat{H} - \mu \hat{N} = & \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t'_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} + U \sum_i \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \\ & + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} + \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}) (\hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow} + \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}) + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} (\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} + \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}) \quad (\text{B.1}) \\ & + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle i,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} (\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} + \hat{c}_{l,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{l,\downarrow}), \end{aligned}$$

y reacomodando los términos obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{H} - \mu \hat{N} = & \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t'_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} + U \sum_i \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \\ & + \frac{V}{2} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} + V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} + \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}) \quad (\text{B.2}) \\ & + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle i,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma} + \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \end{aligned}$$

donde quedan separados los términos de espines paralelos y antiparalelos. Estamos interesados en el caso de espines antiparalelos, así que el hamiltoniano queda de la forma

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \hat{H}_t + \hat{H}_{t'} - \hat{H}_\mu + \hat{H}_U + \hat{H}_V + \hat{H}_{\Delta t} + \hat{H}_{\Delta t_3} \quad (\text{B.3})$$

donde

$$\hat{H}_t = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma}, \quad (\text{B.4})$$

$$\hat{H}_U = \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} t'_{i,j} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma}, \quad (\text{B.5})$$

$$\hat{H}_\mu = -\mu \sum_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}, \quad (\text{B.6})$$

$$\hat{H}_U = U \sum_i \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}, \quad (\text{B.7})$$

$$\hat{H}_V = V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}, \quad (\text{B.8})$$

$$\hat{H}_{\Delta t} = \Delta t \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} + \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}) \quad (\text{B.9})$$

y

$$\hat{H}_{\Delta t_3} = \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle\langle i,l \rangle\rangle, \langle\langle j,l \rangle\rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}. \quad (\text{B.10})$$

La teoría de campo medio se desarrolla para términos de dos partículas tales como (B.7)-(B.10).

• Campo Medio para Operadores de Densidad

Expresamos el operador de densidad en términos de su desviación

$$\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} = \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \right). \quad (\text{B.11})$$

Sustituyendo (B.11) en (B.7)-(B.10) y despreciando términos cuadráticos de $(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle)$ se tiene

$$\begin{aligned} \hat{H}_U &= U \sum_i \left[\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle + \left(\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} - \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle \right) \right] \left[\langle \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \rangle + \left(\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} - \langle \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \rangle \right) \right] \\ &\approx U \sum_i \left[-\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle \langle \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \rangle + \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} + \langle \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \rangle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_V &= V \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \left[\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle + \left(\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} - \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle \right) \right] \left[\langle \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \rangle + \left(\hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} - \langle \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \rangle \right) \right] \\ &\approx V \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \left[-\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle \langle \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \rangle + \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} + \langle \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \rangle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Delta t} &= \Delta t \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \left[\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \right) \right] \left[\langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \rangle + \left(\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} - \langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \rangle \right) \right] \\ &+ \Delta t \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \left[\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \right) \right] \left[\langle \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} \rangle + \left(\hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} - \langle \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} \rangle \right) \right] \\ &\approx \Delta t \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \left[-\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \rangle + \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} + \langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \rangle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] \\ &+ \Delta t \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \left[-\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \langle \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} \rangle + \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} + \langle \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} \rangle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

y

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Delta t_3} &= \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle\langle i,l \rangle\rangle, \langle\langle j,l \rangle\rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} \left[\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} - \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \right) \right] \left[\langle \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \rangle + \left(\hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} - \langle \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \rangle \right) \right] \\ &\approx \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle\langle i,l \rangle\rangle, \langle\langle j,l \rangle\rangle \\ \langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma}} \left[-\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \langle \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \rangle + \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} + \langle \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \rangle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Definiendo

$$n_{ij\sigma} \equiv \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \rangle, \quad (\text{B.16})$$

y sustituyendo en (B.12)-(B.15) obtenemos

$$\hat{H}_U \approx U \sum_i \left[-n_{ii\uparrow} n_{ii\downarrow} + n_{ii\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} + n_{ii\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \right], \quad (\text{B.17})$$

$$\hat{H}_V \approx V \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-n_{ii\uparrow} n_{jj\downarrow} + n_{ii\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} + n_{jj\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} \right] = V \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-n_{ii\uparrow} n_{jj\downarrow} + n_{jj\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow} + n_{jj\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \right], \quad (\text{B.18})$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Delta t} &\approx \Delta t \left[-n_{ij\sigma} n_{ii-\sigma} + n_{ij\sigma} \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} + n_{ii-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] + \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left[-n_{ij\sigma} n_{jj-\sigma} + n_{ij\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} + n_{jj-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] \\ &= \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left[-n_{ij\sigma} (n_{ii-\sigma} + n_{jj-\sigma}) + (n_{ij-\sigma} + n_{ji-\sigma}) \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} + (n_{ii-\sigma} + n_{jj-\sigma}) \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

y

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Delta t_3} &\approx \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle \langle i,j \rangle \rangle, \sigma}} \left[-n_{ij\sigma} n_{ll-\sigma} + n_{ij\sigma} \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} + n_{ll-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] \\ &= \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle \langle i,j \rangle \rangle, \sigma}} \left[-n_{ij\sigma} n_{ll-\sigma} + n_{ij-\sigma} \hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,\sigma} + n_{ll-\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\sigma} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

• Campo Medio para Operadores de Pares

Expresamos los operadores de pares en términos de su desviación

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma} &= \langle \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma} \rangle + \left(\hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma} - \langle \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma} \rangle \right) \\ \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger &= \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \rangle + \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger - \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \rangle \right). \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Para este caso es conveniente reordenar las ecuaciones (B.7)-(B.10) de la forma

$$\hat{H}_U = U \sum_i \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow}, \quad (\text{B.22})$$

$$\hat{H}_V = V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow}, \quad (\text{B.23})$$

$$\hat{H}_{\Delta t} = \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \right) \quad (\text{B.24})$$

y

$$\hat{H}_{\Delta t_3} = \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle \langle i,j \rangle \rangle, \sigma}} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma}, \quad (\text{B.25})$$

donde hemos usado las relaciones de anticonmutación (1.6). Sustituyendo (B.21) en las ecuaciones (B.22)-(B.25) y despreciando términos cuadráticos de $\left(\hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma} - \langle \hat{c}_{i,\sigma} \hat{c}_{j,-\sigma} \rangle \right)$ se tiene que

$$\begin{aligned} \hat{H}_U &= U \sum_i \left[\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \rangle + \left(\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger - \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \rangle \right) \right] \left[\langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle + \left(\hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} - \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle \right) \right] \\ &\approx U \sum_i \left[-\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle + \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \rangle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} + \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right], \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_V &= V \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \rangle + (\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger - \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \rangle) \right] \left[\langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle + (\hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} - \langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle) \right] \\ &\approx V \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-\langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle + \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \rangle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} + \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \langle \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} \rangle \right],\end{aligned}\quad (\text{B.27})$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\Delta t} &= \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left[\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \rangle + (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger - \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \rangle) \right] \left[\langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + (\hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} - \langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle) \right] \\ &+ \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left[\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \rangle + (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger - \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \rangle) \right] \left[\langle \hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + (\hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} - \langle \hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle) \right] \\ &\approx \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left[-\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \rangle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger \langle \hat{c}_{i,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \right] \\ &+ \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left[-\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \rangle \hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,-\sigma}^\dagger \langle \hat{c}_{j,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \right]\end{aligned}\quad (\text{B.28})$$

y

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\Delta t_3} &= \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle \langle i,j \rangle \rangle, \sigma}} \left[\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \rangle + (\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger - \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \rangle) \right] \left[\langle \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + (\hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} - \langle \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle) \right] \\ &\approx \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle \langle i,j \rangle \rangle, \sigma}} \left[-\langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle + \langle \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \rangle \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} + \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger \langle \hat{c}_{l,-\sigma} \hat{c}_{j,\sigma} \rangle \right].\end{aligned}\quad (\text{B.29})$$

Definiendo

$$\begin{aligned}\Lambda_{ij} &\equiv \langle \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} \rangle = -\langle \hat{c}_{j,\uparrow} \hat{c}_{i,\downarrow} \rangle \\ \Lambda_{ij}^* &\equiv \langle \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \rangle = -\langle \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \rangle,\end{aligned}\quad (\text{B.30})$$

y sustituyendo en la ecuaciones (B.26)-(B.29) obtenemos

$$\hat{H}_U \approx U \sum_i \left[-\Lambda_{ii}^* \Lambda_{ii} + \Lambda_{ii}^* \hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} + \Lambda_{ii} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \right], \quad (\text{B.31})$$

$$\hat{H}_V \approx V \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-\Lambda_{ij}^* \Lambda_{ji} + \Lambda_{ij}^* \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{i,\uparrow} + \Lambda_{ji} \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger \right], \quad (\text{B.32})$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\Delta t} &\approx \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-2\Lambda_{ii}^* \Lambda_{ij} + \Lambda_{ii}^* (\hat{c}_{i,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} - \hat{c}_{i,\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow}) + \Lambda_{ij} (\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger) \right] \\ &+ \Delta t \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-2\Lambda_{ij}^* \Lambda_{jj} + \Lambda_{jj} (\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow}^\dagger) + \Lambda_{ij}^* (\hat{c}_{j,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} - \hat{c}_{j,\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow}) \right]\end{aligned}\quad (\text{B.33})$$

y

$$\hat{H}_{\Delta t_3} \approx \Delta t_3 \sum_{\substack{\langle i,l \rangle, \langle j,l \rangle \\ \langle \langle i,j \rangle \rangle}} \left[-2\Lambda_{il}^* \Lambda_{jl} + \Lambda_{il}^* (\hat{c}_{l,\downarrow} \hat{c}_{j,\uparrow} - \hat{c}_{l,\uparrow} \hat{c}_{j,\downarrow}) + \Lambda_{lj} (\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{l,\downarrow}^\dagger - \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{l,\uparrow}^\dagger) \right]. \quad (\text{B.34})$$

Sumando las ecuaciones (B.17)-(B.20) y las ecuaciones (B.31)-(B.34) obtenemos las ecuaciones (4.62)-(4.65) [Mícnas, 1988].

Bibliografía

- [Abrikosov, 1957] A. Abrikosov, “On the magnetic properties of superconductors of the second group”, *Soviet. Phys.* **5**, 1174 (1957).
- [Abrikosov, 1988] A. Abrikosov, *Fundamentals of the theory of metals* (North-Holland, Amsterdam, 1988).
- [Anderson, 1987] P.W. Anderson, “The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity”, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [Anderson, 1992] P.W. Anderson, *Concepts in solids* (Addison-Wesley Pub. Co., New York, 1992).
- [Ashcroft, 1976] N.M. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid state physics* (Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976).
- [Bardeen, 1955] J. Bardeen y D. Pines, “Electron-phonon interaction in metals”, *Phys. Rev.* **99**, 1140 (1955).
- [Bardeen, 1957] J. Bardeen, L.N. Cooper y J.R. Schrieffer, “Microscopic theory of superconductivity”, *Phys. Rev.* **106**, 162 (1957).
- [Bednorz, 1986] J.G. Bednorz y K.A. Müller, “Possible high T_c superconductivity in Ba-La-Cu-O system”, *Z. Physik B* **64**, 189 (1986).
- [Bogoliubov, 1958a] N.N. Bogoliubov, “On a new method in the theory of superconductivity”, *Nuovo Cimento* **7**, 794 (1958).
- [Bogoliubov, 1958b] N.N. Bogoliubov, V.V. Tolmachev y D.V. Shirkov, *A new method in the theory of superconductivity* (Acad. Sci., USSR, 1958).
- [Bruus, 2004] H. Bruus y K. Flensberg, *Many-body quantum theory in condensed matter physics* (Oxford Graduate Texts, 2004).
- [Callen, 1985] H.B. Callen, *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics*, 2nd edition (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1985).
- [Campuzano, 2010] J.C. Campuzano, *et al.*, “Observation of a d -wave nodal liquid in highly underdoped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ”, *Nature*, **6**, 99 (2010).
- [Cooper, 1956] L.N. Cooper, “Bond electron pairs in a degenerate Fermi gas”, *Phys. Rev.* **104**, 1189 (1956).
- [Dagotto, 1994] E. Dagotto, “Correlated electrons in high-temperature superconductors”, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
- [Damascelli, 2003] A. Damascelli, Z. Hussain y S.-X. Shen, “Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors”, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).
- [Davidov, 1981] A.S. Davidov, *Teoría del sólido* (Mir Moscú, 1981) p. 298.
- [De Gennes, 1989] P.G. de Gennes, *Superconductivity of metals and alloys* (Addison-Wesley Publishing Company, Inc., New York, 1989).

- [Devereaux, 1995] T.P. Devereaux y D. Einzel, “Electronic Raman scattering in superconductors as a probe of anisotropic electron pairing”, *Phys. Rev. B* **51**, 16336 (1995).
- [Economou, 2006] E.N. Economou, *Green’s functions in quantum physics*, 3th edition (Springer, Berlin, 2006).
- [Emery, 1987] V.J. Emery, “Theory of high- T_c superconductivity”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [Essler, 2005] H.L. Essler Fabian, *et al.*, *The one-dimensional Hubbard model* (Cambridge University Press, 2005).
- [Feng, 2002] D.L. Feng, *et al.*, “Electronic structure of the trilayer cuprate superconductor”, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 107001 (2002).
- [Frölich, 1950] H. Frölich, “Theory of the superconducting state”, *Phys. Rev.* **79**, 845 (1950).
- [Fulde, 1991] P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids*, Series in Solid State Sciences Vol. 100 (Springer, Berlin, 1991).
- [Galván, 2012] C.G. Galván, L.A. Pérez y C. Wang, “ d -Wave superconductivity from correlated-hopping interactions determined by angle-resolved photoemission spectroscopy”, *Physics Letters A* **376**, 1380 (2012).
- [Giaever, 1974] I. Giaever, “Electron tunneling and superconductivity”, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 245 (1974).
- [Ginzburg, 1950] V.L. Ginzburg y L.D. Landau, *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz.* **20**, 1064 (1950).
- [Goodman, 1964] B.B. Goodman, “Type II or London superconductors”, *Rev. Mod. Phys.* **36**, 12 (1964).
- [Griffiths, 1999] D.J. Griffiths, *Introduction to Electrodynamics*, 3th edition (Prentice Hall, New Jersey, 1999).
- [Griffiths, 2005] D.J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, 2nd edition (Pearson Prentice Hall, New Jersey, 2005).
- [Han, 2002] Q. Han, *et al.*, “Electronic structure of the vortex lattice of d -, $d+is$ -, and $d_{x^2-y^2}+id_{xy}$ -wave superconductors”, *Phys. Rev. B* **65**, 064527 (2002).
- [Han, 2010] Q. Han, “A method of studying the Bogoliubov-de Gennes equations for the superconducting vortex lattice state”, *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 035702 (2010).
- [Hess, 1989] H.F. Hess, *et al.*, “Scanning-tunneling-microscope observation of the Abrikosov flux lattice and the density of states near and inside a fluxoid”, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 214 (1989).
- [Hirsch, 1989] J.E. Hirsch, “Singlet pairs, covalent bonds, superexchange, and superconductivity”, *Phys. Lett. A* **136**, 163 (1989).
- [Hubbard, 1963] J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands”, *Proc. Roy. Soc. A* **276**, 238 (1963).
- [Imada, 1998] M. Imada, A. Fujimori y Y. Tokura, “Metal-insulator transitions”, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).

- [Ino, 2002] A. Ino, *et al.*, “Doping-dependent evolution of the electronic structure of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ in the superconducting and metallic phases”, *Phys. Rev. B* **65**, 094504 (2002).
- [Inui, 1995] T. Inui y Y. Onodera, *Group Theory and its Applications in Physics*, 2nd edition (Springer-Verlag, Berlin, 1995).
- [Josephson, 1962] B.D. Josephson, “Possible new effects in superconductive tunneling”, *Phys. Lett.* **1**, 251 (1962).
- [Krakauer, 1988a] H. Krakauer y W.E. Pickett, “Effect of bismuth on high- T_c cuprate superconductors: electronic structure of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ ”, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1665 (1988).
- [Krakauer, 1988b] H. Krakauer, W. E. Pickett, y R.E. Cohen, “Analysis of electronic structure and charge density of the high-temperature superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ”, *J. Supercond.* **1**, 111 (1988).
- [Landau, 1986] L.D. Landau y E.M. Lifshitz, *Física Estadística Vol. 5* (Editorial Reverté, Barcelona, 1986).
- [Landau, 1959] L.D. Landau y E.M. Lifshitz, *Nonrelativistic Quantum Mechanics* (Pergamon, New York, 1959).
- [Lee, 2007] W.S. Lee, *et al.*, “Abrupt onset of a second energy gap at the superconducting transition of underdoped $\text{Bi}2212$ ”, *Nature* **450**, 81 (2007).
- [Martindale, 1993] J.A. Martindale *et al.*, “Magnetic-field dependence of planar copper and oxygen spin-lattice relaxation rates in the superconducting state of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ”, *Phys. Rev. B* **47**, 9155 (1993).
- [Matsuzaki, 2004] T. Matsuzaki, N. Momono, M. Oda, M. Ido, “Electronic specific heat of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$: pseudogap formation and reduction of the superconducting condensation energy”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 2232 (2004).
- [Maxwell, 1950] E. Maxwell, “Isotope effect in the superconductivity of mercury”, *Phys. Rev.*, **78**, 477 (1950).
- [Micnas, 1988] R. Micnas y J. Ranninger, “Superconductivity in a narrow-band system with intersite electron pairing in two dimensions: A mean-field study”, *Phys. Rev. B* **37**, 9410 (1988).
- [Micnas, 1990] R. Micnas, J. Ranninger y S. Robaszkiewicz, “Superconductivity in narrow-band systems with local nonretarded attractive interactions”, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 113 (1990).
- [Millán, 2005] J.S. Millán, L.A. Pérez y C. Wang, “ p -wave superconductivity in a two-dimensional generalized Hubbard model”, *Phys. Lett. A* **335**, 505 (2005).
- [Mirmelstein, 1997] A. Mirmelstein, *et al.*, “Mixed-state specific heat of the type-II superconductor $\text{Nb}_{0.77}\text{Zr}_{0.23}$ in magnetic fields up to B_{c2} ”, *J. of Superconductivity* **10**, 527 (1997).
- [Momono, 1994] N. Momono, *et al.*, “Low-temperature electronic specific heat of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ and $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-y}\text{Zn}_y\text{O}_4$. Evidence for a d wave superconductor”, *Physica C* **233**, 395 (1994).
- [Moler, 1997] K.A. Moler *et al.*, “Specific heat of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ”, *Phys. Rev. B* **55**, 3954 (1997).
- [Navarro, 2007] O. Navarro y R. Baquero, *Ideas Fundamentales de la Superconductividad* (UNAM, México, 2007).

- [Nelson, 2004] K.D. Nelson, Z.Q. Mao, Y. Maeno y Y. Liu, “Odd-parity superconductivity in Sr₂RuO₄”, *Science* **306**, 1151 (2004).
- [Norman, 1998] M.R. Norman, *et al.*, “Destruction of the Fermi surface in underdoped high- T_c superconductors”, *Nature* **392**, 157 (1998).
- [Pathria, 1972] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Pergamon Press, Oxford, 1972).
- [Peierls, 1933] R. Peierls, “Zur Theorie der Metalle”, *Z. Phys.* **80**, 763 (1933).
- [Pérez, 2002] L.A. Pérez y C. Wang, “ d -wave hole superconductivity in low-dimensional Hubbard systems”, *Solid State Commun.* **121**, 669 (2002).
- [Pérez, 2010] L.A. Pérez, J.S. Millán y C. Wang, “Spin singlet and triplet superconductivity induced by correlated hopping interactions”, *Int. J. Mod. Phys. B* **24**, 5229 (2010).
- [Pérez, 2013] L.A. Pérez, C.G. Galván y C. Wang, “ARPES-parameterized Hubbard approach to d -wave cuprate superconductors” (en proceso de publicación, 2013).
- [Poole, 2007] C.P. Poole, H.A. Farach y R.J. Creswick, *Superconductivity*, 2nd. Edition (Elsevier, Amsterdam, 2007).
- [Reynolds, 1950] C.A. Reynolds, B. Serin, W.H. Wright y L.B. Nesbitt, “Superconductivity of isotopes of mercury”, *Phys. Rev.* **78**, 487 (1950).
- [Rickayzen, 1965] G. Rickayzen, *Theory of Superconductivity* (Wiley & Sons, New York, 1965).
- [Saxon, 1968] D.S. Saxon, *Elementos de Mecánica Cuántica* (EASO, México, 1968) p.397.
- [Schilling, 1993] A. Schilling, M. Cantoni, J.D. Guo y H.R. Ott, “Superconductivity above 130 K in the Hg–Ba–Ca–Cu–O system”, *Nature* **363**, 56 (1993).
- [Shi, 2008] M. Shi, *et al.*, “Coherent d -wave superconducting gap in underdoped La_{2-x}Sr_xCuO₄ by angle-resolved photoemission spectroscopy”, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 047002 (2008).
- [Singh, 1994] D.J. Singh y W.E. Pickett, “Unconventional oxygen doping behavior in HgBa₂Ca₂Cu₃O_{8+δ}”, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 476 (1994).
- [Su, 1998] G. Su y M. Sazuki, “Nonexistence of $d_{x^2-y^2}$ superconductivity in the Hubbard model”, *Phys. Rev. B* **58**, 117 (1998).
- [Tinkham, 1996] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, 2nd. Edition (McGraw-Hill, U.S.A, 1996).
- [Tsuei, 2000] C.C. Tsuei y J.R. Kirtley, “Pairing symmetry in cuprate superconductors”, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 969 (2000).
- [Tsuneto, 1998] T. Tsuneto, *Superconductivity and Superfluidity*, (Cambridge University Press, 1998).
- [Wang, 1995] Y. Wang y A.H. MacDonald, “Mixed-state quasiparticle spectrum for d -wave superconductors”, *Phys. Rev. B* **52** R3876 (1995).
- [Wollman, 1993] D.A. Wollman, D.J. Van Harlingen, y A.J. Leggett, “Experimental determination of the superconducting pairing state in YBCO from the phase coherence of YBCO-Pb dc SQUIDS”, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2134 (1993).

- [Wu, 1987] M.K. Wu, J.R. Ashburn, C.J. Torng, P.H. Hor, R.L. Meng, L. Gao, Z.J. Huang, Y.Q. Wang, y C.W. Chu., “Superconductivity at 93 K in a new mixed-phase Y-Ba-Cu-O compound system at ambient pressure”, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 908 (1987).
- [Yang, 1962] C.N. Yang, “Concepts of off-diagonal long-range order and the quantum phases of liquid He and of superconductors”, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1962).
- [Yoshida, 2006] T. Yoshida, *et al.*, “Systematic doping evolution of the underlying Fermi surface of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ”, *Phys. Rev. B* **74**, 224510 (2006).
- [Zhang, 1988] F.C. Zhang y T.M. Rice, “Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides”, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).