

14 00362



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FISICAS
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES
EN MATERIALES

SUPERCONDUCTIVIDAD CON INTERACCIONES
ATRACTIVAS INTERFERMIONICAS TIPO
DELTA REGULARIZADAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS

(F I S I C A)

P R E S E N T A :

ALBERTO SALAZAR MARTINEZ

DIRECTORES DE TESIS: DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA.
DR. MIGUEL ANGEL SOLIS ATALA.

pcf

posgrado en ciencias físicas
u n a m

MEXICO, D. F.

junio de 2002

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

ESTADÍSTICAS NO SUJETS
DE LA BIBLIOTECA

ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA
ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA
ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA

ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA
ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA
ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA

ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA
ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA
ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA

ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA
ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA
ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA

ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA
ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA
ESTADÍSTICAS DE LA BIBLIOTECA

NOO 2121
MAY 20 1951



posgrado en ciencias físicas
u n a m

Estimado(a) Colega:

El Comité Académico del Posgrado en Ciencias Físicas en su sesión del 16 de abril del presente ha designado como Jurado del alumno ALBERTO SALAZAR MARTÍNEZ con número de cuenta 9251832-6, para dictaminar si el trabajo desarrollado como tesis titulado: "*Superconductividad con interacciones interfermiónicas atractivas tipo Delta regularizadas*", dirigido por los Doctores Manuel de Llano de la Garza y Miguel Ángel Solís Atala, tiene los méritos para obtener el grado de MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA) conforme al plan de estudios 4009.

Adjunto a este documento recibirá la versión de la tesis para su revisión.

Presidente: Dr. Manuel de Llano de la Garza

Recibi ejemplar

Secretario: Dr. Roberto Escudero Derat

Recibi ejemplar

Vocal: Dr. Rafael Ángel Barrio Paredes

Recibi ejemplar

Suplente: Dr Miguel Ángel Solís Atala

Recibi ejemplar

Suplente: Dr Onofre Rojo Asenjo

Recibi ejemplar

Atentamente.
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Ciudad Universitaria, D. F., a 17 de abril de 2002.
La Coordinadora del Posgrado en Ciencias Físicas

Dra. Rocío Jáuregui Renaud

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

71

100

100

100

100

100

100

100

100

100

100

100

100

100

100

100

100 BENT
ENTRE COM
MEDIO DO ALIAN

100

100

100

Índice General

Resumen	i
Dedicatoria	ii
Agradecimientos	iii
1 Introducción	1
2 La superconductividad	6
2.1 El problema de Cooper	6
2.2 Superconductividad BCS	9
2.3 Superconductividad y Condensación Bose-Einstein	12
2.4 La bidimensionalidad en la HTSC	16
3 El potencial delta en d dimensiones	18
3.1 Estados ligados en pozos esféricamente isotrópicos	18
3.2 El potencial delta	19
3.3 Pozos delta en 1D y 3D	20
3.3.1 Delta atractiva en 1D	20
3.3.2 Delta atractiva en 3D	20
3.4 Potencial atractivo delta en 2D	22
3.5 Potenciales delta regularizados	27
4 Apareamiento en 2D y transición BCS-Bose	31
4.1 modelo de interacción Nozières y Schmitt-Rink	31
4.2 energía de condensación	34
4.3 Fracción de electrones apareados	36
4.3.1 modelo estadístico binario	36
4.3.2 En el modelo BCS	37
5 Relación de dispersión de los pares en 2D	40
5.1 Ecuación de Cooper con $K > 0$	40
5.1.1 Interacción δ	41
5.1.2 Interacción BCS	42
5.2 Límite de baja densidad	43

6 Conclusiones	46
Apéndice A	
Colapso del sistema de muchas partículas con interacción δ atractiva en 2D y 3D	50
Bibliografía	54
Índice de Figuras	58
Índice de Tablas	60

Resumen

En esta tesis se resuelve el problema de una partícula en un pozo totalmente isotrópico llevado al límite de una interacción delta atractiva, que resulta tener un número infinito de estados ligados en dos dimensiones, al igual que en el caso tridimensional. Este problema es particularmente importante en las teorías de superconductividad de cupratos, que son materiales cuasi-bidimensionales, donde se puede tener un apareamiento de Cooper debido a potenciales arbitrariamente débiles. Debido al número infinito de estados ligados que tiene el pozo, y a que su estado más ligado es infinitamente ligado, tanto en 2D como en 3D, un sistema de N fermiones interactuando via un potencial delta se *colapsaría* completamente pues tanto la energía de amarre por partícula como la densidad de partículas se vuelven infinitas, sin importar cuán pequeño sea el valor del potencial de interacción.

Para evitar este colapso del sistema, se usan potenciales atractivos tipo δ regularizados en los pozos cuánticos, tanto en 2D como en 3D, de modo tal que se pueda asegurar un *único* estado ligado en el pozo δ resultante. Introduciendo explícitamente la interacción δ -regularizada en el sistema bidimensional de N fermiones (a temperatura cero), se reproducen, de forma analítica, ecuaciones *exactas* para el potencial químico y la brecha ("gap") de energía. Estas ecuaciones ilustran el llamado régimen de Bose de baja densidad de partículas y/o interacciones fuertes; ambas habían sido obtenidas anteriormente por Miyake en 1983 al investigar la posibilidad de superfluidez en un líquido degenerado de Fermi en 2D. Con ayuda de estas dos ecuaciones se calcula, para este régimen, la energía de condensación del sistema, que corresponde exactamente a la energía de formación de un gas de $N/2$ dímeros con energías de amarre definidas.

Por último, a partir de la ecuación de eigenvalores de Cooper generalizada, se obtiene una expresión para la relación de dispersión de los pares como una serie a segundo orden en términos del momento total de estos. Después se estudia el comportamiento de esta serie en el límite cuando la energía de Fermi tiende a cero, i. e., una densidad cero del gas de electrones. Este tipo de desarrollo muestra la importancia del término lineal en la relación de dispersión de los pares, permitiéndoles una condensación Bose-Einstein en 2D exactamente.

Dedicatoria

Dedico esta tesis a mis padres, a toda mi familia y mis amigos, gracias por todo su apoyo.

Pocas de las grandes aventuras culturales de Occidente gozan hoy en día de tan buena salud como el desarrollo científico, siendo uno de los aspectos más generales donde es posible que hombres de todo el mundo intenten estar de acuerdo, y muy a menudo lo consigan. Son muchos los temas de la ciencia contemporánea que resultan apasionantes para un joven científico como yo; espero abordarlos a su tiempo, pues con el conjunto de todos ellos nuestra sociedad ha cambiado su historia y su vida futura. Esto representa a la vez un reto y una aventura, que parece interminable.

A S.

Agradecimientos

Quiero expresar mi más cordial reconocimiento al Dr. Manuel de Llano y al Dr. Miguel Angel Solís por su valioso estímulo e interés en el tema de esta tesis; por su apoyo y sugerencias a lo largo de la elaboración de la misma.

A los restantes miembros del jurado, Dr. Roberto Escudero, Dr. Onofre Rojo, y en especial al Dr. Rafael Barrio, por sus comentarios, su oportuna revisión y las horas que dedicaron para leer el manuscrito y aclarar varios puntos valiosos en este trabajo de tesis.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca de Maestría otorgada a través del proyecto 27828-E *Superconductividad como una Condensación de Bose-Einstein* que he disfruté a lo largo de la elaboración de esta tesis.

Al Instituto de Investigaciones en Materiales y al Instituto de Física por facilitarme la consulta de libros y artículos en revistas científicas necesarios para realizar esta tesis, y por el uso de su sala y equipos de cómputo e instalaciones en general.

A la Unidad Académica de Posgrado por su orientación y haber facilitado la redocumentación de mi inscripción de los semestres transcurridos en esta casa de estudios.

Al Posgrado en Ciencias Físicas por su trabajo y ayuda en diversos trámites, además del apoyo para la impresión de los ejemplares de la tesis.

Por último, quiero agradecer a la Universidad Nacional Autónoma de México y a la Facultad de Ciencias por mi formación académica.

Capítulo 1

Introducción

Desde el descubrimiento de la conductividad perfecta en 1911 [1], la superconductividad ha ofrecido la perspectiva de una amplia gama de aplicaciones. Más adelante [2] se halló que la superconductividad incluye también la expulsión del campo magnético del interior del superconductor. A partir de entonces comenzaron a desarrollarse teorías fenomenológicas para explicar tanto las propiedades térmicas como las electromagnéticas de los superconductores. Mientras los avances experimentales continuaban (e. g., efecto Josephson [3]), la superconductividad permaneció como un fenómeno complicado de explicar satisfactoriamente desde un punto de vista microscópico. Los primeros modelos hablaban de dos fluidos de electrones, uno superconductor y otro normal. Se sabía para entonces que el hecho más fundamental en la transición superconductor, del cual se derivan tanto la conductividad como el diamagnetismo perfectos, es un rompimiento de simetría en la norma de Coulomb del potencial vectorial del campo electromagnético. Con una elección adecuada de la norma y del potencial vectorial, en 1935 London [4] fue capaz de predecir el efecto Meissner dentro del superconductor y determinar la longitud de penetración l del campo magnético. En 1950 Ginzburg y Landau [5] elaboraron una descripción fenomenológica que caracteriza al estado electrónico superconductor mediante dos componentes: un superfluido o condensado y un fluido normal, e introducen el parámetro llamado longitud de correlación $\xi(x)$, que determina la escala dentro de la cual hay variaciones apreciables del campo *escalar* complejo Ψ , que es un parámetro de orden superconductor. La dependencia de la temperatura crítica T_c con la masa de los isótopos superconductores, marcó el camino a seguir para comprender más detalladamente el fenómeno. En 1956 [6] Leon Cooper plantea la existencia de pares de electrones unidos por una interacción atractiva fonónica originada en la red cristalina de

iones del superconductor y determina la energía de amarre de estos pares. El desarrollo de esta idea llevó a la creación de la teoría microscópica de J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer, conocida como teoría BCS [7], que predice la existencia de una brecha de energía $\Delta(T)$ (que se desvanece para $T = T_c$) por encima del nivel de Fermi, E_F , de los electrones; esta brecha ("gap") es la energía necesaria para destruir un par de electrones en el condensado superfluido. Para entonces se creía generalmente que la superconductividad sólo podía ocurrir en metales a temperaturas no mayores a unos 40 K. No fue sino hasta 1986 que Bednorz y Mueller descubrieron superconductividad a temperaturas sustancialmente mayores (actualmente la temperatura de transición máxima es 134 K) en cupratos. La aparición de los cupratos superconductores marcó la apertura de un nuevo capítulo conocido como "High Temperature Superconductivity", o simplemente HTSC. Estos cupratos son cerámicas de difícil manejo, con pocos portadores de carga comparados con los metales, pero cuyo antiferromagnetismo puede ser destruido mediante dopajes, relativamente bajos, que permiten introducir hoyos con cierta movilidad dentro de la estructura. El dopaje permite modificar la estructura al grado de formar un estado distinto de orden estable, metálico, a partir del cual es posible tener transiciones superconductoras hoy en día con $0 < T_c < \sim 160$ K. Los cupratos superconductores poseen propiedades de anisotropía tanto eléctricas como magnéticas. En ellos la superconductividad ocurre primordialmente en los planos casi perfectos de óxidos de cobre. El entendimiento de la HTSC es uno de los grandes problemas de la física actual, contando con miles de investigadores que trabajan en este tópico en todo el mundo. Aunque las propiedades en el estado normal y superconductor de los materiales HTSC no son esencialmente las de los superconductores convencionales, después de más de una década de trabajo, hay consenso entre un buen número de científicos respecto a que una modificación adecuada de la teoría BCS dará una explicación satisfactoria tanto de la transición superconductoras como de las propiedades del estado superconductor en HTSC. Podemos citar varias razones para explicar el extraordinario interés que la HTSC ha despertado: su interés científico intrínseco; su carácter interdisciplinario, que va de la ciencia de materiales a la química y de la física teórica a la física experimental; las aplicaciones potenciales para materiales cuya temperatura de transición está por encima del nitrógeno líquido (77 K); la expectativa de hallar superconductores a temperatura ambiente. Esta tesis es un resultado más de los múltiples esfuerzos que se realizan actualmente para elaborar una teoría BCS-generalizada que explique la superconductividad a alta temperatura crítica.

Una de las dificultades encontradas en las teorías de superconductividad es que las interacciones de apareamiento no se conocen del todo, de modo

que, aparte de utilizar el formalismo y aproximaciones de la teoría cuántica de muchos cuerpos, debemos *modelar* las fuerzas de interacción entre los electrones y a partir de ellas calcular las propiedades resultantes del sistema.

Dentro de la construcción de estos modelos de interacción, un caso especialmente interesante para el estudio de la superconductividad de altas temperaturas en los cupratos, que son sistemas cuasi-bidimensionales, es el de un gas en 2D de electrones interactuando. Ahora, teniendo en mente el papel que juegan los estados ligados de dos partículas en las teorías de superconductividad, dentro de las interacciones bidimensionales, el caso de una interacción atractiva de *contacto*, a saber, la tipo delta de Dirac, resulta aún más interesante desde el punto de vista académico, pues en 2D es muy poco conocido (en libros de texto avanzados sólo se da como problema propuesto) e *inédito* dentro del estudio de pozos cuánticos con potenciales δ .

Comenzamos el Capítulo 2 de esta tesis resolviendo el problema de Cooper de eigenvalores de energía para dos fermiones que interactúan por encima del nivel de Fermi; así se obtiene la energía de formación de un par de Cooper. Continuamos con un breve resumen de la teoría microscópica BCS de superconductividad y reproducimos algunos resultados básicos de ésta que nos serán útiles más adelante. Dentro del formalismo de segunda cuantización, al incluir una interacción atractiva en el hamiltoniano de los electrones que interactúan, el problema en teoría de muchos cuerpos para los de eigenvalores de energía se aborda introduciendo la teoría de cuasipartículas de Landau, que proporciona una correspondencia uno a uno con un sistema *modelo* de cuasipartículas cuyas energías se ven afectadas por la presencia de otras cuasipartículas. Estas cuasipartículas tienen una energía de excitación mínima $\Delta(T)$, la función de brecha, que, bajo la interacción BCS modelo, es determinada al resolver la ecuación secular del hamiltoniano, escrito en términos de operadores de creación-anihilación de las cuasipartículas. Dentro del mismo formalismo se reproduce la expresión BCS para la energía de condensación a temperatura cero.

Un ingrediente que no está presente en la teoría BCS es el de la formación de pares *antes* de la transición superconductor y su posterior condensación. Por esta razón se hace a continuación en el mismo Capítulo 2 un breve resumen de la superconductividad como una condensación Bose Einstein (CBE). El desarrollo de esta idea lleva implícito un análisis de la naturaleza de las partículas superconductoras susceptibles de condensarse (parones) en cuanto a su relación de dispersión, pues en general la dimensionalidad de los sistemas implica restricciones en ella para posibilitar la CBE. Para terminar este capítulo, debido al énfasis que haremos del problema bidimensional, se menciona la importancia de éste dentro de la superconductividad a temperaturas altas.

Con las motivaciones expuestas, en el Capítulo 3 estudiamos con detenimiento los estados ligados en pozos isotrópicos cuyos potenciales son llevados al límite de una función delta de Dirac en d dimensiones. Específicamente, en 2D hallamos que dicho pozo tiene un número infinito de estados ligados, $n \rightarrow \infty$, de modo que el estado más ligado del pozo δ es infinitamente ligado. En este mismo capítulo se reproducen los casos mejor conocidos en 3D donde, igualmente, se tienen estados ligados $n \rightarrow \infty$, una vez que se cumple una condición mínima del potencial para el primer estado ligado, y en 1D donde hay un sólo estado ligado. Tanto en 2D como en 3D, si tuviéramos un sistema de N fermiones interactuando via este potencial atractivo delta $-v_0\delta(\mathbf{r})$, con $v_0 > 0$, las parejas de electrones se acomodarían en los infinitos niveles de energía, de los cuales el más bajo es infinitamente negativo; dicho sistema se *colapsaría* de forma similar a una estrella de neutrones, pues la energía de amarre por partícula $E/N \rightarrow -\infty$. Como se muestra en el Apéndice A, este colapso se completa con una densidad de partículas infinita en $N \rightarrow \infty$. Por último, y para prevenir este colapso, introducimos los potenciales atractivos regularizados en el límite δ , introducidos por P. Gosdzinsky y R. Tarrach en 1991, con los cuales se tiene tanto en 2D como en 3D sólo un estado ligado por pozo, con energía definida.

En el Capítulo 4 tomamos el sistema de N fermiones en 2D con la interacción atractiva δ regularizada a la manera de una interacción modelo BCS y, para la interacción en cuestión, vemos que una solución autoconsistente de las ecuaciones de brecha y de número de partículas nos permite reproducir los resultados exactos en 2D presentados por Miyake en 1983, respecto al potencial químico μ y la brecha de energía Δ , parametrizados por la energía de amarre del par en el vacío, B_2 . Utilizando estas relaciones obtenemos a continuación la energía de condensación del sistema $\Delta E = -\frac{1}{2}NB_2$, que representa la energía de un gas ideal de $N/2$ partículas con energías de ligadura (o amarre) B_2 . Finalmente calculamos y discutimos la fracción de electrones apareables que están apareados tanto desde el punto de vista de la teoría BCS como con un modelo estadístico de equilibrio químico en un gas binario.

En el Capítulo 5 tratamos la relación de dispersión de pares de Cooper excitados (con momento total del centro de masa $K \neq 0$), debido a la importancia que ésta tiene en condensación BE para $d > 1$. A partir de la solución de la ecuación de eigenvalores de Cooper, obtenemos la relación de dispersión ε_K de los pares como una serie a segundo orden en términos de K e investigamos el comportamiento de los términos lineal y cuadrático de ε_K en el límite tanto de densidad cero del gas de electrones, i.e., cuando el mar de Fermi se desvanece, como para acoplamiento débil.

En el Capítulo 6 presentamos nuestras conclusiones respecto a los resul-

tados obtenidos. Finalmente, en el Apéndice A se obtiene el valor propio de la energía Hartree-Fock (HF) por partícula del sistema de N fermiones con interacción δ , usando ondas planas; este valor es una cota superior del valor propio exacto de la energía del estado base. Usando lo anterior se muestra que al tener un número de partículas infinito el sistema se colapsaría con una energía de amarre por partícula y una densidad infinitas, tanto en 2D como en 3D.

Capítulo 2

La superconductividad

2.1 El problema de Cooper

Las entidades básicas del estado superconductor son pares de electrones o pares de Cooper, estados ligados de dos partículas $(\mathbf{k}_{1\sigma}, \mathbf{k}_{2\sigma})$, donde σ indica el estado de espín y \mathbf{k} el momento del electrón¹. El mecanismo que está detrás de la formación de pares depende de las propiedades electrónicas del estado normal del sólido. Ahora, a diferencia de los núcleos de ^3He de los superfluidos, los electrones de un material en el estado normal pueden considerarse como un gas ideal, de modo que para la existencia de estados ligados de dos partículas en este gas electrónico, es *necesaria* la intervención de interacciones atractivas interfermiónicas de dos partículas $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. En la teoría estándar de superconductividad, esta interacción atractiva es debida a la deformación y la consecuente polarización de la red cristalina, causada por un electrón. Sin embargo, únicamente los electrones más cercanos al nivel de Fermi son *aptos* para participar de esta interacción, pues sus energías deben estar dentro de una pequeña región o banda de energías alrededor de E_F . Esta región es de tamaño $\hbar\omega_D$ ² para los superconductores de bajas temperaturas críticas o metálicos. Una vez establecida esta interacción atractiva neta (que supera a la repulsión de Coulomb) de origen fonónico entre los electrones, Cooper demostró [6] que la inestabilidad del sistema en esta franja es provocada por el apareamiento de electrones, como se ve después en [8] y [9]. El planteamiento de esta idea como un proceso generalizado en el gas de electrones, permite obtener, de manera

¹ en esta sección y en adelante hablaremos de electrones dentro del sólido refiriéndonos propiamente a estados de Bloch de una partícula.

² la energía fonónica característica, con ω_D la frecuencia de Debye, que determina la magnitud de las distorsiones de la red del material.

autoconsistente entre cada apareamiento de electrones y el mar de Fermi restante, como espectador, un *gap* o energía de excitación mínima $\Delta(T)$ que poseen los pares. Esta brecha de energía los separa del estado normal del sólido al no existir suficiente energía térmica en la red para dispersarlos. Al formarse más y más pares, favorecen otro tipo de distribución estadística del sistema, debido a que alrededor de la superficie del mar de Fermi más y más estados están disponibles para el apareamiento.

L. N. Cooper [6] tomó dos electrones con energías $\epsilon_k = \hbar^2 k^2/2m$ y masa efectiva m en posiciones \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 , respectivamente, situados en un gas de Fermi de N partículas en su estado base (donde el potencial químico $\mu = E_F$) y aplicó entre ellos la interacción responsable de formar un par $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r})$, donde $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ es la coordenada relativa. La función de onda del par $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$, con $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ la coordenada del centro de masa, cumple con la Ec. de eigenvalores de Schrödinger independiente del tiempo

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{4m} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (2.1)$$

donde E es el eigenvalor de energía. Intentando la separación de variables, $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \equiv \Phi(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r})$, tenemos que $\Phi(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}$, con $\mathbf{K} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)$ el momento del centro de masa, de modo que la Ec. (2.1) para la coordenada relativa es

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{m} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = \left(E - \frac{\hbar^2 \mathbf{K}^2}{4m} \right) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

Ahora, el par de Cooper estará formado por el estado $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$, de modo que quedará en reposo el centro de masa, i. e., $\mathbf{K} = 0$. Mientras tanto, la presencia de los $N-2$ electrones restantes tiene como efecto evitar que los dos electrones que forman el par ocupen estados por debajo del nivel de Fermi. Esto se incluye introduciendo de [9], pág. 388, la combinación lineal

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k} > \mathbf{k}_F} A_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.3)$$

donde $A_{\mathbf{k}}$ es un coeficiente de expansión tal que a los estados con $k < k_F$ corresponde $A_{\mathbf{k}} = 0$, con $k_F = |\mathbf{k}_F|$ dado por $E_F = \hbar^2 k_F^2/2m$. Usando (2.3) en (2.2) tenemos

$$(2\epsilon_{\mathbf{k}} - E) A_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} = 0 \quad (2.4)$$

donde ϵ_k es la energía correspondiente al estado k y

$$V_{k,k'} \equiv L^{-d} \int d^d r \int d^d r' e^{-ik \cdot r} V(r, r') e^{ik' \cdot r'} \quad (2.5)$$

$$= L^{-d} \int d^d r V(r) e^{i(k-k') \cdot r}, \quad (2.6)$$

con L la longitud del sistema, es la doble transformada de Fourier en d dimensiones del potencial de interacción $V(r, r')$ entre las partículas y hemos usado $L^{-d} \int d^d r e^{i(k-k') \cdot r} = \delta_{k,k'}$. En la Ec. (2.4) se define la cantidad

$$\Delta_k \equiv \sum_{k'} V_{k,k'} A_{k'} \quad (2.7)$$

que al usarse en la misma (2.4) nos lleva a $A_k = \Delta_k / (E - 2\epsilon_k)$; ahora, al introducir (de manera autoconsistente) A_k en la misma Ec. (2.4) tenemos

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{\Delta_{k'}}{E - 2\epsilon_k} \quad (2.8)$$

Como apuntamos arriba, la energía disponible para la interacción es del orden de la energía de Debye, típicamente del orden de unas decenas de eV ($\hbar\omega_D \ll E_F$), como se muestra en la Figura 2.1, de modo que en esta región el potencial de interacción atractivo se considera isotrópico y de magnitud constante, con lo cual introducimos la llamada interacción modelo BCS para el potencial de interacción $V_{k,k'}$

$$V_{k,k'} = \begin{cases} -V & \hbar\omega_D - E_F < \epsilon_k, \epsilon_{k'} < \hbar\omega_D + E_F \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (2.9)$$

donde $V > 0$ es una constante y al usarse en (2.8) se tiene

$$\Delta_k = V \sum_{k'}' \frac{\Delta_{k'}}{2\epsilon_k - E} \quad (2.10)$$

donde la prima sobre la sumatoria indica que se consideran aquellos estados sobre el nivel de Fermi donde la interacción (2.9) es distinta de cero. Ahora, como consecuencia de la interacción modelo (2.9) anotamos, de [9], pág. 399, que, como puede apreciarse en el segundo miembro de (2.10), Δ_k no depende de k ; del mismo modo $\Delta_{k'}$ no depende de k' ; por consiguiente

$\Delta_k = \Delta$, con lo que se simplifica la ecuación anterior

$$1 = V \sum_k \frac{1}{2\epsilon_k - E} = V \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} d\epsilon \frac{g(\epsilon)}{2\epsilon - E} \quad (2.11)$$

$$\simeq \frac{1}{2} g(E_F) V [\ln(2\epsilon - E)]_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} \quad (2.12)$$

$$\Rightarrow E = 2E_F - \frac{2\hbar\omega_D}{e^{2/\lambda} - 1} \equiv 2E_F - \Delta_0 \quad (2.13)$$

donde hemos introducido $g(\epsilon)$, la densidad de estados por unidad de energía y se han definido tanto la constante de interacción $\lambda \equiv g(E_F) V$ como Δ_0 , la energía de amarre de un par de electrones que se hallan situados en el mar de Fermi

$$\Delta_0 \equiv \frac{2\hbar\omega_D}{e^{2/\lambda} - 1} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 2\hbar\omega_D e^{-2/\lambda} \quad (2.14)$$

La Ec. (2.12) para 1D y 3D es una aproximación pues se supuso que $g(\epsilon) \simeq g(E_F)$. Esta aproximación es de hecho bastante común en superconductividad dentro del intervalo $10^{-3} < \nu \equiv \hbar\omega_D/E_F < 10^{-2}$ para los materiales superconductores. No obstante, recordemos que, en general

$$g(\epsilon) \propto \begin{cases} \epsilon^{1/2} & 1D \\ \text{const.} & 2D \\ \epsilon^{-1/2} & 3D \end{cases}, \quad (2.15)$$

de modo que en 2D *no hay aproximación* sino igualdad en (2.12).

2.2 Superconductividad BCS

La teoría BCS [7] es la teoría microscópica históricamente más exitosa de superconductividad y hasta la fecha sigue siendo considerada como la teoría estándar de superconductividad, aunque sus predicciones ya han sido rebasadas experimentalmente. En la teoría BCS se parte de un estado fundamental $|\Psi_G\rangle = \sum_{k>k_F} A_k c_{k\sigma}^+ c_{-k\sigma}^+ |0\rangle$, donde $c_{k\sigma}^+$ y $c_{k\sigma}$ son los operadores de creación y aniquilación de un estado electrónico con momento k y espín σ y A_k es un coeficiente de expansión, formado por electrones con momentos k y $-k$ que pueden formar pares alrededor del nivel de Fermi. El siguiente paso es escribir un hamiltoniano con interacción

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}, \quad (2.16)$$

donde $V_{k,k'}$ está dado en general en (2.5). El número total de partículas N (considerando los estados de espín) es

$$N = \sum_{k,\sigma} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \equiv \sum_{k,\sigma} n_k, \quad (2.17)$$

con $n_k = c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} = n_{k\uparrow} + n_{k\downarrow}$ el número de ocupación. Para calcular el estado de mínima energía del sistema de electrones se busca diagonalizar el hamiltoniano (2.16). Esta diagonalización se realiza hallando la transformación de Bogoliubov-Valatin [10] adecuada, que introduce los operadores $\gamma_k, \gamma_{k'}$ y sus conjugados, que crean cuasipartículas o estados-par ($k \uparrow, 0$) y ($0, k' \downarrow$) llamadas bogolones, en honor a Bogoliubov; estos bogolones tienen la propiedad de incluir ya en su relación de dispersión $E_k = (\epsilon_k^2 + \Delta_k^2)^{1/2}$ a la brecha o energía de excitación mínima del par Δ_k . Explícitamente estas transformaciones son

$$\begin{aligned} \gamma_k &= u_k c_k - v_k c_k^+ \\ \gamma_k^+ &= u_k c_k^+ - v_k c_k, \end{aligned} \quad (2.18)$$

donde v_k, u_k son los coeficientes a determinar y representan a su vez la amplitud de probabilidad de que un estado-par esté ocupado o no, respectivamente, y deben cumplir $u_k^2 + v_k^2 = 1$. Al escribir el hamiltoniano (2.16) en términos de los operadores introducidos se halla el valor esperado de energía del estado fundamental $E_0 = \sum_k 2\epsilon_k v_k^2 + \sum_{k,k'} V_{k,k'} u_k v_k u_{k'} v_{k'}$, cuya condición mínima $\partial E_0 / \partial v_k = 0$ nos lleva a [11]

$$2\epsilon_k u_k v_k + (u_k^2 - v_k^2) \sum_{k'} V_{k,k'} u_{k'} v_{k'} = 0, \quad (2.19)$$

la cual resulta equivalente a la ecuación secular de (2.16). De la Ec. (2.19) [11] se define (ver antes 2.8) la función de brecha

$$\Delta_k \equiv \sum_{k'} V_{k,k'} u_{k'} v_{k'} = \sum_{k'} V_{k,k'} (1 - v_{k'}^2)^{1/2} v_{k'}, \quad (2.20)$$

donde se aplicó la condición $u_k^2 + v_k^2 = 1$. Observemos que, en general, el valor de Δ_k depende de la interacción $V_{k,k'}$ y del espectro de energías ϵ_k . Usando la variable $x_k \equiv \frac{1}{2} - u_k^2 = v_k^2 - \frac{1}{2}$ y (2.20) se resuelve (2.19) para la variable x_k y se obtiene $x_k = \pm \frac{1}{2} \epsilon_k / \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2}$ que, reinsertada de manera autoconsistente en esta misma ecuación, nos permite obtener

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\epsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}} \quad (2.21)$$

$$\hbar\omega_D \approx 3 \times 10^2 \text{ K}$$

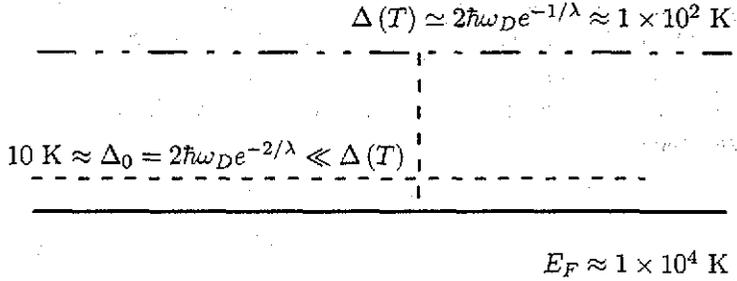


Figura 2.1: Se ilustra la diferencia entre la energía de amarre del par de Cooper (con momento del centro de masa $K = 0$) Δ_0 , y el gap de excitación mínima BCS Δ para un valor de acoplamiento $\lambda \simeq 0.5$: $\Delta_0 = 2\hbar\omega_D e^{-2/\lambda} \ll \Delta \approx 2\hbar\omega_D e^{-1/\lambda}$.

como solución. Esta ecuación tiene al menos solución numérica y representa una variable macroscópica del superconductor. Ahora, utilizando en (2.21) la interacción (2.9) se tiene

$$\frac{1}{V} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{(\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2)} = \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega_D} d\epsilon \frac{g(\epsilon)}{(\epsilon^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2)}, \quad (2.22)$$

donde al pasar a la forma integral se considera que hay simetría respecto al nivel de Fermi y $g(\epsilon) \simeq g(E_F)$ (exacto en 2D). Introduciendo la variable $\xi_{\mathbf{k}} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}} - E_F$ en la ecuación anterior, se tiene

$$\Delta = \hbar\omega_D (\sinh[1/\lambda])^{-1} \quad (2.23)$$

$$\xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 2\hbar\omega_D e^{-1/\lambda} \quad (2.24)$$

Comúnmente, sobre todo en el límite de acoplamiento débil $\lambda \rightarrow 0$, esta función de brecha Δ se confunde con Δ_0 , la energía de amarre de pares de

Cooper [6], Ec. (2.14). Esta distinción se ilustra en la Fig. 2.1³ donde Δ_0 es menor en un orden de magnitud a la brecha de energía $\Delta(T)$ que, como se menciona en [9], pág. 401, es una propiedad colectiva del sistema; su existencia explica de qué manera el estado superconductor es más favorable para el sistema que el correspondiente estado normal, pues la energía total del sistema es menor. Esto se verifica al calcular, usando el formalismo BCS en $T = 0$, la diferencia entre las energías del estado base del estado superconductor, E_s , y del estado normal, E_n . Este corrimiento entre las energías, o energía de condensación, resulta [12], [13], con $g(\epsilon) \simeq g(E_F)$

$$E_s - E_n = 2g(E_F) \int_0^{\hbar\omega_D} d\epsilon \left[\epsilon - \frac{2\epsilon^2 + \Delta^2}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \right] \quad (2.25)$$

$$= g(E_F) (\hbar\omega_D)^2 \left[1 - \sqrt{1 + (\Delta/\hbar\omega_D)^2} \right] \quad (2.26)$$

$$= -g(E_F) \hbar\omega_D \Delta_0 \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} -g(E_F) \Delta^2/2. \quad (2.27)$$

Para los materiales BCS, la energía de condensación es típicamente de orden de 10^{-8} eV/átomo. La expresión (2.27) de [13] indica que el corrimiento de energías corresponde a la energía necesaria para la formación de un gas de pares de Cooper. En la Ref. [7] se usa la aproximación (2.24) en (2.26) para obtener el resultado para $\lambda \rightarrow 0$ dado en (2.27), pero no aparece el paso intermedio, exacto y válido para cualquier valor de acoplamiento.

2.3 Superconductividad y Condensación Bose-Einstein

Hay una creencia generalizada de que tanto en los fenómenos de superconductividad como en la superfluidez existe una dependencia decisiva en la naturaleza de agregación bosónica de los pares de fermiones involucrados [14]. Por ejemplo, el efecto Josephson [3] de tunelaje entre superconductores puede ser explicado a través de un sólo parámetro de orden que describe conjunta y simultáneamente a todo el sistema de pares superconductores y ha sido observado también en helio-3 superfluido, donde es posible explicar las dos fases estables por medio del mismo parámetro de orden. Un condensado de Bose-Einstein (CBE), postulado teóricamente en 1924, es el estado de agregación de la materia más novedoso conocido además del sólido, líquido, gas y plasma. Al disminuir la energía disponible del sistema, las funciones de onda de los átomos vecinos se traslapan unas con otras y todo

³ Si el lector está familiarizado con la física atómica, le resultará útil recordar que la energía de la temperatura ambiente (300 K) es 1/40 eV

el sistema comienza a comportarse como un solo objeto cuántico. En el año de 1995 se confirmó por primera vez la condensación Bose-Einstein en nubes ultra frías de átomos alcalinos [15]; como se ilustra en la Fig. 2.2, a medida que la temperatura desciende se observa el fenómeno de CBE, en que los átomos ocupan mayoritariamente el estado cuántico de rapidez más baja, el estado base. Esta transición hacia un estado de *condensación de la materia* es completamente nuevo y ajeno a los otros estados de agregación de la materia que se conocían hasta entonces; de hecho, este trabajo ha merecido el otorgamiento del premio Nobel de Física en el año 2001. Recientemente se han obtenido condensados BE con átomos de Hidrógeno [16], y Helio [17]. Estas nubes condensadas pueden existir aun dentro de un circuito integrado (*chip*), que manipula haces de átomos en lugar de electrones [18]. Al igual que la superconductividad, el fenómeno de condensación BE es fascinante para los físicos por ser una manifestación *macro o mesoscópica* de las leyes de la mecánica cuántica. En nuestros días, es necesario saber aún más física para comprender y aplicar muchas propiedades en ellos. Ahora bien, en contraste con la física de plasmas, los condensados BE son fenómenos que tienen temperaturas críticas muy bajas ($\sim 50 \times 10^{-9}$ K), apenas por encima del cero absoluto. Un condensado de BE es un sistema altamente coherente. Sin embargo, en los condensados obtenidos hasta ahora sólo están involucrados átomos, sin redes cristalinas con muchos grados de libertad y/o interacciones complejas entre ellos, a diferencia tanto de los superfluidos como de los pares de Cooper en superconductividad.

En la teoría BCS, las correlaciones par-par que determinan las configuraciones de mínima energía están supuestamente incluidas en el modelo estadístico de Fermi-Dirac. La probabilidad de que dos estados k y k' que forman un par o dímero estén ocupados simultáneamente es pequeña excepto cuando éstos se relacionan por una condición de apareamiento: para un estado k hay una pareja k' para la cual la probabilidad de ocupación es mayor. Este tipo de correlación [19], y la factibilidad de existencia de los dímeros, formados por estados ligados de pares de electrones, nos permite reafirmar la conjetura presentada ya en [20] de que la superconductividad puede ser explicada mediante una condensación en espacio k de los electrones apareados, es decir, que existe una bosonización del sistema. Por tanto, el estado superconductor bien puede hacerse corresponder con una condensación de Bose-Einstein en el gas de dímeros o pares formados en el gas fermiónico con interacción. La transición de fase superconductor tendrá entonces similitudes a las transiciones observadas en la formación de los condensados en nubes atómicas, salvo que la naturaleza de las interacciones subyacentes no está del todo clara, ni será tan sencilla como los sistemas mesoscópicos de [15], [16] y [17]. Sin embargo, muchas propiedades de los materiales de HTSC ya han sido explicadas anteriormente utilizando

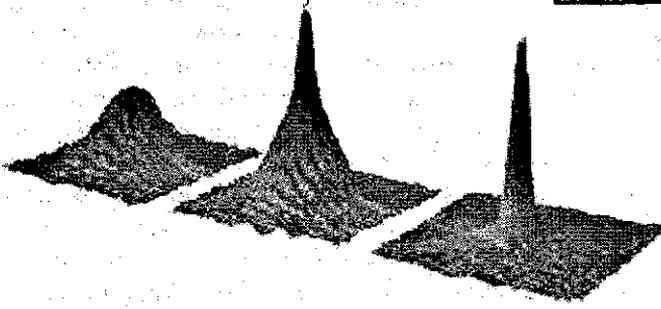


Figura 2.2: Secuencia de la distribución de velocidades de un condensado de Bose-Einstein en un gas de átomos bosónicos de Na. A medida que $T \rightarrow T_c$ la mayoría de las partículas tienen la misma rapidez, cercana a cero, y comparten una misma función de onda. La dispersión observada para $T < T_c$ es debida al principio de incertidumbre de Heisenberg (Tomada de <http://www.cua.mit.edu> del MIT)

una transición entre el régimen BCS (acoplamientos débiles y/o alta densidad de fermiones) y el régimen de Bose (acoplamientos fuertes y/o baja densidad de fermiones) mediante renormalizaciones de la teoría BCS [21].

En general [22], para un gas ideal de bosones *permanentes* en d dimensiones, con una relación de dispersión cuadrática de éstos, $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, sólo es posible una CBE para $d > 2$; sin embargo, si la relación de dispersión es *lineal*, habrá una CBE para $0 < T < T_c \neq 0$ para toda $d > 1$. Por lo tanto, la posibilidad de superconductividad como una CBE está abierta, para todo material con $d > 1$. Específicamente en superconductividad, los electrones, que por supuesto no son bosones, forman pares (con un espín total entero) que son considerados cuasi-bosónicos, pues si bien no cumplen con las leyes de conmutación de Bose, tienen, en una primera aproximación, funciones de onda que se pueden construir [8], a partir de combinaciones simétricas de las funciones de onda de los dos electrones que las componen. Ahora [23], para un valor de momento total de excitación K dado del par se tiene un número de ocupación indefinidamente grande para los valores de momentos relativos k de los electrones que lo forman. Por lo tanto obedecerán la estadística de Bose-Einstein de la misma manera que los fonones o excitones presentes en el sólido. De esta distribución térmica se puede derivar una CBE en el estado base, que pueda ser responsable de la aparición de la superconductividad. Además, en [23] se

sospecha que estas cuasipartículas bosónicas se mueven con una relación de dispersión lineal para momentos del centro de masa $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \neq 0$ pequeños. De manera que, teniendo una relación de dispersión lineal, los quasi-bosones son susceptibles de condensarse macroscópicamente, mientras la temperatura desciende, en cualquier dimensión $d > 1$, mientras sea posible obtener un alto número de ellas, a través de la predominancia del proceso de apareamiento. Por lo tanto, si las diversas conjeturas respecto a la condensación Bose-Einstein (CBE) son acertadas, un punto básico para el entendimiento de la teoría de la superconductividad es hallar un mecanismo específico de apareamiento que originaría estos pares cuasibosónicos, mecanismos cuya naturaleza sólo puede ser estudiada mediante el análisis de las propiedades y cantidades conocidas para los superconductores en una generalización de la teoría BCS, donde al formarse pares de Cooper excitados que se propaguen con una relación de dispersión lineal y se comporten como bosones, de modo que pueda ocurrir una CBE en cualquier sistema superconductor con dimensión $d > 1$.

2.4 La bidimensionalidad en la HTSC

Los cupratos de altas temperaturas críticas se conocieron en 1986 [24]. Estos compuestos a partir del $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ tienen temperaturas críticas por encima del nitrógeno líquido (77 K) [25] y marcaron el inicio de la "High Temperature Superconductivity" (HTSC), donde existe la posibilidad de una verdadera revolución tecnológica de aplicaciones. De hecho, hoy en día, los cupratos superconductores de altas temperaturas alcanzan temperaturas críticas tan altas como 134 K [26], y aun 164 K [27] en el compuesto HgBaCaCuO a altas presiones; muchos de ellos tienen ya múltiples aplicaciones tecnológicas como componentes en filtros de microondas, en cableado de alta potencia, electroimanes de dispersión-beer en aceleradores de partículas y en sistemas de almacenamiento de energía. Una aplicación promisoría a gran escala (superconductores tipo II) es la construcción de trenes de alta velocidad que usan levitación magnética (MAGLEV); en Japón existe una pista experimental de 43 Km para uno de estos trenes [28].

Una característica a notar de los cupratos superconductores de altas temperaturas críticas es su anisotropía: consisten de planos de CuO_2 que encierran a los elementos Ba, Y, La, etc. Medidas cuidadosas en estos compuestos llevadas a cabo alrededor del mundo, permiten concluir que son sistemas cuya superconducción es prácticamente bidimensional, ya que todos los portadores de importancia, tanto de carga como de espín, están alojados en los planos de óxidos de cobre. Podemos decir que la superconductividad en ellos es manifiestamente bidimensional. Experimentalmente

[29] se han encontrado estas temperaturas críticas altas en superconductores de dimensiones fraccionarias que, para fines prácticos, se han llamado cuasibidimensionales, o bien, con dimensiones $2 + \varepsilon$ (donde $\varepsilon \rightarrow 0$).

Una línea distinta de búsqueda de superconductividad condujo al descubrimiento de superconductores orgánicos [30] llamados sales de Bechgaard (~ 12 K), donde se observa una superconductividad $1 + \varepsilon$ dimensional a través de las cadenas de átomos. Además, en los compuestos de C_{60} cristalinos llamados fullerenos se ha hallado también superconductividad [31], y recientemente [32] se llegó a una $T_c = 117$ K por medio de dopajes a baja temperatura que distorsionan la estructura. Hay evidencia de que en HTSC la formación de pares de Cooper es responsable de la aparición de superconductividad [33]. En estos compuestos, el estado apareado en el cristal tiene simetría $d_{x^2-y^2}$ [34] y por tanto, se afirma [27] que los portadores provienen de los orbitales híbridos $O_{2p} - d_{x^2-y^2}$, que dominan el proceso de apareamiento.

La teoría BCS que explica los superconductores clásicos (los conocidos antes de 1986) no explica ni predice estos valores de *temperaturas críticas altas*. En la actualidad muchos físicos teóricos comparten el reto de construir una teoría aceptable que permita describir y predecir materiales con temperaturas críticas aún más altas que los conocidos. Por ejemplo, Anderson propone regresar al modelo de líquido de Fermi [35] y Mott ha introducido los llamados bipolarones [36]. Un buen resumen de las tendencias en superconductividad lo ha elaborado Ginzburg [37]; una revisión de tendencias actuales en HTSC pueden hallarse en la Ref. [27].

Pero como hemos apuntado, la pregunta que históricamente es primordial se refiere a la naturaleza de la interacción que origina el apareamiento. En principio, en teorías de HTSC ya no se puede hablar de apareamientos exclusivamente de origen fonónico y además un modelo de interacción de apareamiento en superconductividad debe incluir y/o revisar detalladamente también la dimensionalidad del sistema. Como veremos más adelante, la naturaleza de los estados ligados en un potencial esférico atractivo está igualmente muy relacionada con la dimensionalidad de éste.

Sea cual sea la interacción de apareamiento, específicamente en un gas de N electrones en 2D se tiene la posibilidad de un tratamiento analítico exacto. El problema en 2D de muchas partículas que estudiaremos fue formulado primeramente por Miyake [38] a $T = 0$ usando el formalismo BCS y resolviendo las ecuaciones de brecha y de número autoconsistentemente, pero sin hacer referencias explícitas en cuanto al potencial de interacción subyacente pues basta que éste sea sustituible por una matriz de dispersión. Más tarde Randeria *et al.* [39] reproducen estas ecuaciones y analizan la evolución de los estados ligados entre los límites de acoplamiento fuerte y débil, los cuales corresponden, respectivamente, a estados formados por

bosones puntuales compuestos (condensables) y a estados de pares de Cooper que se superponen unos con otros.

Capítulo 3

El potencial delta en d dimensiones

3.1 Estados ligados en pozos esféricamente isotrópicos

Lo presentado en el capítulo anterior establece que una interacción electrón-fonón puede llevar a una interacción atractiva entre electrones. Recordando el problema de Cooper en la sección 2.1, si transformamos el sistema de dos partículas a centro de masa (CM) y coordenada relativa, tenemos el problema de una sola partícula en un potencial atractivo. Como modelo para los estados ligados de dos electrones, y considerando que nos interesan los estados más ligados, usaremos pozos esféricos totalmente isotrópicos (i. e., cuyo potencial no tiene dependencia angular) con longitud característica a y profundidad efectiva V_0 . Es importante darnos cuenta aquí que, en general, una interacción atractiva (débil) entre dos fermiones no da lugar a estados ligados *necesariamente*, como veremos a continuación en el caso tridimensional.

Las energías $E < 0$ para estados ligados de una partícula de masa m en un pozo esféricamente isotrópico de profundidad $-V_0$ y extensión a han sido estudiadas en 1D [41] y 3D [42]. En el primer caso, la energía del estado base E_0 puede expandirse alrededor de $V_0 a$ pequeña como

$$E_0 \xrightarrow{V_0 a \rightarrow 0} -\frac{2ma^2 V_0^2}{\hbar^2} + O(V_0^3) \quad \text{1D} \quad (3.1)$$

Similarmente, en 3D, una expansión de E_0 alrededor de $\eta \equiv V_0 a^2 - \hbar^2 \pi^2 / 8m$

pequeña da

$$E_0 \xrightarrow{\eta \rightarrow 0} -\frac{m\eta^2}{2\hbar^2 a^2} + O(\eta^3) \quad 3D \quad (3.2)$$

Concretamente, en 1D *siempre* existe un estado ligado sin importar cuán somero y/o estrecho sea el pozo, mientras que en 3D para que exista el primer estado ligado es *necesario* un valor crítico $\hbar^2 \pi^2 / 8m$ para $V_0 a^2$. Los casos 1D y 3D son ambas expansiones *perturbativas* alrededor de un parámetro de “pequeñez” apropiado.

Por otra parte, un pozo circular en 2D de profundidad V_0 y radio a , tendrá siempre un estado ligado [40], sin importar qué tan somero y/o estrecho sea éste. Sin embargo, en este caso la expansión es *no perturbativa* y da, para el estado ligado más bajo

$$E_0 \xrightarrow{v_0 a^2 \rightarrow 0} -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \exp\left(-\frac{2\hbar}{mV_0 a^2}\right), \quad 2D \quad (3.3)$$

el cual *no* puede ser desarrollado en potencias de $V_0 a^2$. Por tanto, los resultados que se deriven en 2D resultarán inaccesibles a cualquier método que dependa de la expansión perturbativa en $V_0 a^2$.

3.2 El potencial delta

Podemos representar un potencial δ atractivo $V(\mathbf{r}) = -v_0 \delta(\mathbf{r})$ ($v_0 > 0$) en d dimensiones a partir del pozo de potencial

$$V(\mathbf{r}) = -V_0 \theta(a - r), \quad (3.4)$$

donde $\theta(x)$ es la función escalón, a la extensión del pozo y $V_0 \geq 0$ su profundidad, tomando el límite

$$-v_0 \delta(\mathbf{r}) \equiv -\lim_{\substack{V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0 \\ \ni a^d V_0 = \text{const.}}} V_0 \theta(a - r), \quad (3.5)$$

donde $v_0 \equiv c_d a^d V_0$ es una constante positiva y $c_d = \pi^{d/2} / \Gamma(d/2 + 1)$. Obsérvese que para cualquier dimensión d , en (3.4) $V(\mathbf{r}) = V(r)$, sin dependencia angular, pero en (3.5) la función $\delta(\mathbf{r})$ es vectorial; esta particularidad se justifica para los potenciales δ de corto alcance que tratamos en este capítulo, pues suponemos que los estados ligados más bajos son estados s , con simetría esférica. Por inspección, podemos ver que se cumple que $\int d^d r \delta(\mathbf{r}) = 1$.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula de masa m en el potencial $V(\mathbf{r})$ es

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) - \frac{2m}{\hbar^2} [V(\mathbf{r}) - E] \Psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.6)$$

Con el potencial (3.4) en la anterior ecuación bajo el límite delta (3.5) buscaremos las soluciones $E \equiv -|E| < 0$ que representan los estados ligados del pozo con interacción δ .

3.3 Pozos delta en 1D y 3D

3.3.1 Delta atractiva en 1D

Para 1D la variable $r \geq 0$ significa $|x|$. Las soluciones de (3.6) $\Psi(x) = e^{\pm px}$ [41] tienen derivada discontinua en $x = a$ en el límite de potencial delta, $-v_0\delta(x)$, donde

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} 2aV_0 \equiv v_0 < \infty, \quad (3.7)$$

y siempre hay un (único) estado ligado, $E = -mv_0^2/2\hbar^2$ ($v_0 \neq 0$). Nótese que el resultado en 1D con el método de Landau de un pozo *somero* [43] con $|E| \ll \max|V(x)|$ sería

$$E = -\frac{m}{2\hbar^2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) \right]^2,$$

el cual, para el potencial $V(x) = -v_0\delta(x)$ es

$$E = -\frac{m}{2\hbar^2} v_0^2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) \right]^2 = -\frac{mv_0^2}{2\hbar^2}, \quad (3.8)$$

que concuerda con lo dado en [41].

3.3.2 Delta atractiva en 3D

Para el potencial (3.4) en 3D, la solución de la Ec. de Schrödinger de la partícula [42] es una función de onda en coordenadas esféricas $\Psi(\mathbf{r}) = R_l(kr)Y_{lm}(\theta, \varphi)$, donde Y_l son los armónicos esféricos y la parte radial $R_l(x)$ es una función esférica de Bessel de orden l [44], pág. 722. En la parte interna del pozo, $0 \leq r \leq a$, las soluciones son funciones esféricas del primer tipo $j_l(Kr) < \infty$ en $r = 0$, con $K^2 \equiv 2m(V_0 - |E|)/\hbar^2$. Para la parte externa del mismo, $r \geq a$, las soluciones son funciones esféricas

modificadas $k_l(kr)$, con $k^2 \equiv 2m|E|/\hbar^2$, que decaen exponencialmente y son finitas cuando $r \rightarrow \infty$. La condición de frontera de continuidad de la parte radial y de su derivada, en $r = a$, es

$$\left. \frac{d}{dr} j_l(Kr) \right|_{r=a^-} = \left. \frac{d}{dr} k_l(kr) \right|_{r=a^+} \quad (3.9)$$

Para $l = 0^1$, usamos de [44], págs. 730 y 733, $j_0(x) = \text{sen}(x)/x$, y $k_0(x) = e^{-x}/x$ para llegar a la condición

$$K \cot(Ka) = -k, \quad (l = 0). \quad (3.10)$$

La solución gráfica dada en [42] de (3.10) muestra que el número n de estados ligados está dado por la condición

$$(n - 1/2)\pi \leq \left(\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \right)^{1/2} \leq (n + 1/2)\pi; \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.11)$$

de donde podemos ver que habrá un primer estado ligado en $n = 0$ cuando

$$V_0a^2 \geq \pi^2 \hbar^2 / 8m \quad (3.12)$$

como se había mencionado después de (3.2). Ahora bien, para el potencial delta tenemos

$$\begin{aligned} \lim_{V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} \int d^3r V_0 \theta(a-r) &= \int d^3r v_0 \delta(r) \\ &= \lim_{V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} \frac{4}{3} \pi a^3 V_0 \equiv v_0 < \infty. \end{aligned} \quad (3.13)$$

En (3.11) vemos que $\lim_{V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} (2mV_0a^2/\hbar^2)^{1/2} = \infty$ mientras se cumpla la condición (3.12), pues, de acuerdo a la Ec. (3.13), $\lim_{V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} V_0a^2 = \lim_{V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} (3v_0/4\pi a) = \infty$. Es decir, el pozo δ en 3D tendrá un número infinito de estados ligados. Es posible calcular las energías $l = 0$ de estados ligados $E_n = -\hbar^2/2ma^2 (\pi^2/4 + \varepsilon_n^2)$, donde ε_n son las raíces adimensionales de (3.10).

¹ recordemos que buscamos los valores de energía mínima.

3.4 Potencial atractivo delta en 2D

En 2D, las soluciones de la ecuación de Schrödinger (3.6) del pozo con un potencial (3.4) son $\Psi(r) = f(r)e^{i\nu\phi}$ con $\nu = 0, 1, 2, \dots$ y la variable angular $-\pi \leq \phi \leq \pi$. Para $0 \leq r \leq a$ la parte radial de la solución es una función cilíndrica de Bessel de orden entero [44], pág. 669, $J_\nu(Kr)$, finita en $r = 0$ y $K^2 \equiv 2m(V_0 - |E|)/\hbar^2$. En la región exterior $r > a$, se tienen funciones de Bessel modificadas $K_\nu(kr)$, con $k^2 \equiv 2m|E|/\hbar^2$, regulares en el límite $r \rightarrow \infty$. Los estados ligados están determinados por las condiciones de continuidad de la función y su primera derivada en la frontera $r = a$

$$\left. \frac{d}{dr} J_\nu(Kr) \right|_{r=a^-} \frac{J_\nu(Kr)}{J_\nu(Kr)} \Big|_{r=a^-} = \left. \frac{d}{dr} K_\nu(kr) \right|_{r=a^+} \frac{K_\nu(kr)}{K_\nu(kr)} \Big|_{r=a^+} \quad (3.14)$$

De donde, para $\nu = 0$, usando de [45], pág. 361 $dJ_0(Kr)/dr = -KJ_1(Kr)$, $dK_0(kr)/dr = -kK_1(kr)$, tenemos

$$Ka \frac{J_1(Ka)}{J_0(Ka)} = ka \frac{K_1(ka)}{K_0(ka)} \quad (3.15)$$

En (3.15) siempre se cumple que $K_1(x) > K_0(x) > 0$, de modo que su segundo miembro es siempre una función positiva creciente. Por otra parte, observemos que $J_0(x)$ oscila en las x y por tanto el primer miembro de (3.15) diverge positivamente cada vez que $J_0(x) = 0$, cambiando de signo y empezando de nuevo desde $-\infty$ al continuar la oscilación, como se ve en la Fig. 3.1 donde se han graficado los dos miembros de la condición (3.15); en la misma figura se ilustran los lugares correspondientes a los estados ligados con círculos vacíos en las intersecciones de ambas curvas. De esta manera vemos claramente que siempre habrá un estado ligado entre dos ceros consecutivos de $J_0(x)$. El número n de estados ligados para un intervalo dado en ka , dependerá de la distancia entre los ceros consecutivos de esta función.

Para el potencial delta en 2D tenemos

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} \pi V_0 a^2 \equiv v_0 < \infty, \quad (3.16)$$

de modo que $ka \xrightarrow{V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} 0$ y a la vez $Ka \xrightarrow{V_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} \sqrt{2mv_0/\pi\hbar^2} < \infty$, pero no necesariamente $\ll 1$, mientras $|E|$ sea finito. Las funciones de Bessel oscilan de manera casi periódica para valores grandes de su argumento, y podemos usar de [45], pág. 364, para el miembro izquierdo de (3.14), las formas asintóticas $J_0(x) \xrightarrow{x \gg 1} \sqrt{2/\pi x} \cos(x - \pi/4)$ y $J_1(x) \xrightarrow{x \gg 1} \sqrt{2/\pi x} \cos(x - \pi/4)$

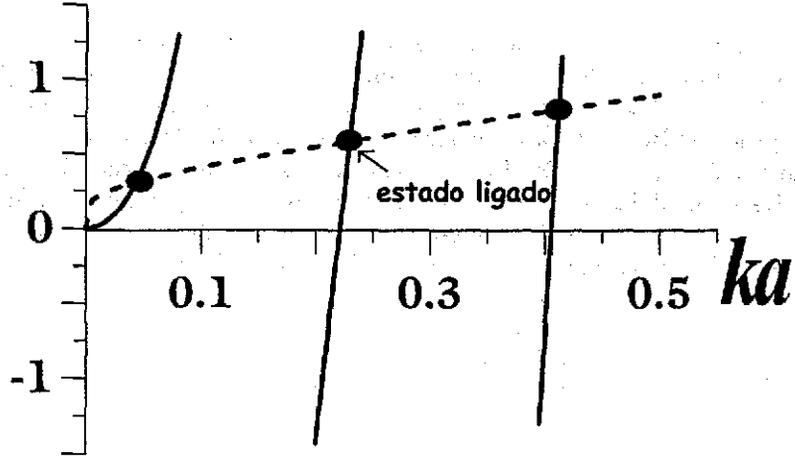


Figura 3.1: El primer (curva llena) y segundo (curva discontinua) miembros de (3.15) para el pozo en 2D con $V_0/|E| = 300$; las intersecciones de las curvas, marcadas con círculos, indican los estados ligados. Siempre habrá un estado ligado entre dos ceros consecutivos de la función $J_0(x)$.

$\pi/2 - \pi/4$) y para el segundo miembro tendremos² $xK_1(x)/K_0(x) \xrightarrow{x \ll 1} -1/\ln x$; ambos miembros preservan su comportamiento en ka . Observemos que $Ka = (V_0/|E| - 1)^{1/2} ka$ por lo que a medida que la interacción se lleva al límite delta (3.5), el argumento de $J_0(x)$ aumenta por el factor $\alpha \equiv (V_0/|E| - 1)^{1/2}$, por lo tanto los ceros consecutivos de la función $J_0(Kr)$ se aproximan unos a otros. Para un intervalo dado de anchura $k_L a$, el número n de estados ligados será $n = \alpha k_L a / \pi$, de donde, en el límite delta (cuando $V_0/|E| \rightarrow \infty$) el número de estados ligados n aumentará indefinidamente. Es decir, para el límite de interacción δ tendremos un número n de estados ligados *infinito*. De esta manera hemos concluido que el pozo delta en 2D soporta un número infinito de estados ligados, al igual que el caso en 3D, pero en este caso sin existir una profundidad mínima del pozo similar a (3.12) para que exista el primer estado ligado. A

²usamos de la Ref. [40], pág. 613, $K_\nu(x) \xrightarrow{x \ll 1} \frac{1}{2}\Gamma(\nu)(\frac{1}{2}x)^{-\nu}$ para $\nu = 1$, y $K_0(x) \xrightarrow{x \ll 1} -\ln x$.

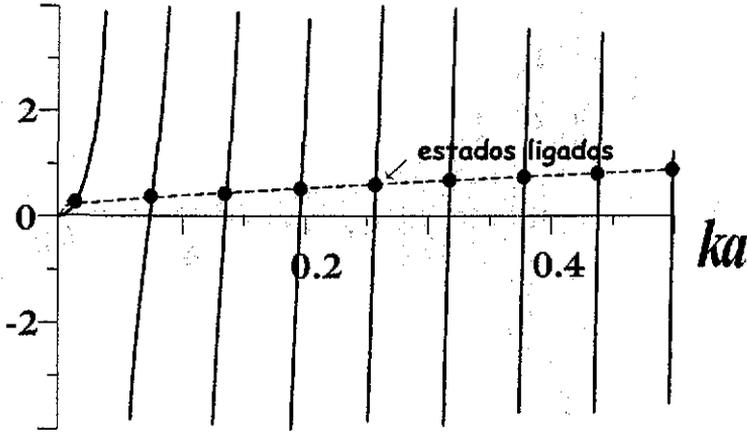


Figura 3.2: Condición (3.15) pero para $V_0/|E| = 2700$. El número de estados ligados aumenta a medida que el potencial (3.4) se aproxima a una función delta de Dirac

continuación veremos que el estado más ligado del pozo δ es infinitamente ligado.

Los estados ligados del pozo pueden ser fácilmente identificables como las raíces de la ecuación

$$\alpha x_n J_1(\alpha x_n) K_0(x_n) - x_n K_1(x_n) J_0(\alpha x_n) = 0, \quad (3.17)$$

que es simplemente una reescritura de la condición (3.14); como puede verse en la Fig. 3.3, las raíces de (3.17) $x_n \equiv k_n a = \sqrt{2m|E_n|/\hbar^2}$ se suceden de manera creciente *ad infinitum* de modo que el estado más ligado es infinitamente ligado.

Presentamos en la Tabla 3.1 los valores más bajos de soluciones numéricas de (3.17) para ciertos valores de $V_0/|E|$, estos valores se ordenan siempre de manera creciente y están relacionados con los estados ligados $E = -\hbar^2 x_n^2/2m$ del pozo. Ahora, de acuerdo al principio de exclusión de Pauli, el número de ocupación por cada nivel de energía es 2 como máximo. Como se ilustra en la Fig. 3.4, esto hace que la interacción atractiva δ en un sistema en 2D o en 3D de N fermiones represente la ocupación escalonada

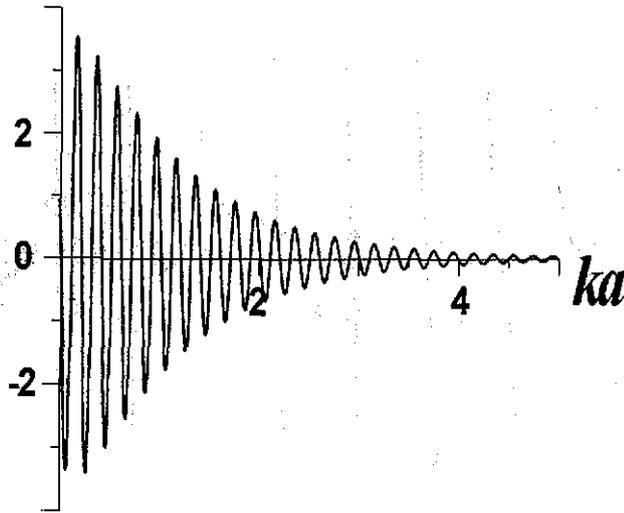


Figura 3.3: Ilustración de la condición (3.17) donde cada raíz representa un estado ligado. Con el comportamiento oscilatorio mostrado se puede apreciar que las raíces de (3.17) formarán un conjunto infinito y ordenado crecientemente, de modo que el estado más ligado será infinitamente ligado.

de un número infinito de niveles de energía. Como el estado más ligado es infinitamente ligado, un sistema tal se *colapsaría* pues tendría energías de amarre por partícula infinitas. En el Apéndice A se dan más detalles respecto al colapso.

$V_0/ E $	x_1	x_2	x_3	x_4
10	0.3738	1.4216	2.4674	3.5137
10^3	0.0218	0.1248	0.2245	0.3240
10^5	0.0123	0.0223	0.0323	0.0422

Tabla 3.1: Primeras raíces de (3.17), $x_n = -\sqrt{2m|E_n|/\hbar^2}a$ para los estados ligados de un pozo en 2D de acuerdo a (3.14), con distintos valores de $V_0/|E|$.

En el método usado en [43], con $\nu = 0$ para un pozo *somero* en el que $V_0 \rightarrow 0$ y $|E| \ll V_0$, se toman Ka y $ka \rightarrow 0$ con lo que, al usar en (3.14)



las aproximaciones [45] $J_\nu(x) \xrightarrow{x \ll 1} x^\nu/2^\nu \nu!$, para $\nu = 0$ y 1 , tenemos

$$-\frac{1}{(Ka)^2} = \frac{\ln ka}{2}, \quad (3.18)$$

con lo que al hacer $V_0 - |E| \approx V_0$, de (3.18) tenemos

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \exp(-2\hbar^2/mV_0a^2), \quad (3.19)$$

que es la (3.2) y concuerda con [43] salvo un factor, ahí faltante, de $1/2$ en el prefactor.

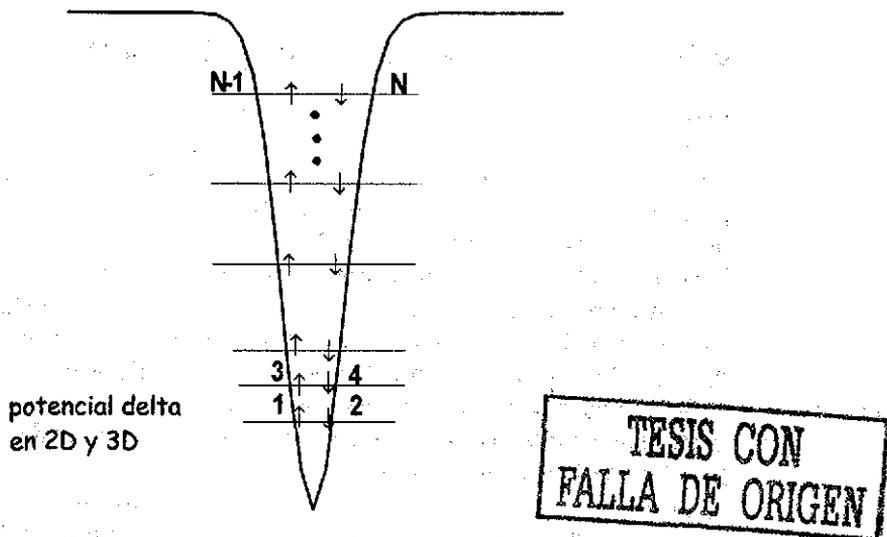


Figura 3.4: El sistema de N fermiones con un potencial de interacción δ lleva al colapso del sistema tanto en 2D como en 3D con una densidad de partículas $n \rightarrow \infty$ y una energía de amarre por partícula E_0/N que diverge a $-\infty$, de acuerdo con el valor variacional en (A.5) que es una cota superior.

De hecho, en [43] para un pozo somero en 2D, el estado ligado está dado por

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \exp\left(-\hbar^2/m \left| \int_0^\infty dr r V(r) \right| \right) \quad (3.20)$$

que con el potencial $V(r) = -V_0\theta(a-r)$, da el resultado (3.19), que no puede ser desarrollado en potencias de V_0a^2 . Recordando (3.16) tenemos para el potencial $-v_0\delta(r)$ en 2D

$$E \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \exp(-2\hbar^2\pi/mv_0), \quad (3.21)$$

que tiene la forma $f(\lambda) = e^{-1/\lambda} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 0$, i.e., posee una singularidad *esencial* o irremovible en $\lambda = 0^3$. Ahora, teniendo en mente el papel de los estados ligados de dos partículas en superconductividad, lo anterior sugeriría, con el ejemplo del potencial δ en 2D, que el estado base superconductor no puede ser visto como una expansión perturbativa del estado normal.

3.5 Potenciales delta regularizados

Estamos interesados en describir un gas estable de electrones interactuantes como modelo de superconductividad. Nuestra siguiente tarea en cuanto estados ligados de dos partículas, será utilizar en los pozos cuánticos los potenciales con interacción δ -regularizada [46], con el fin de evitar el colapso del sistema (ver Apéndice A) de N fermiones, tanto en 2D como en 3D, ilustrado en la Fig. 3.4. En general, la regularización de potenciales permite dar un marco simple a muchos conceptos básicos de la teoría cuántica de campos, que de esta manera pueden ser explicados con la mecánica cuántica más sencilla. Como veremos, el potencial delta de Dirac es un problema que se trata mejor al introducir una regularización. Más aún, los potenciales regularizados que utilizaremos están especialmente diseñados para que los pozos atractivos tengan un estado ligado único.

Si siguiendo los requerimientos dados en [46] para la regularización del potencial δ en 2D consideraremos el potencial de regularización atractivo

$$V_a(r) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{2}{a^2(\ln|a/a_0|)} \theta(a-r), \quad (a_0 > a > 0) \quad (3.22)$$

donde $m^* = m/2$ es la masa reducida de un par, a es la anchura del pozo, y a_0 es un parámetro arbitrario que medirá en adelante la extensión o alcance de la interacción. El potencial (3.22) representará ahora la profundidad de

³lo cual puede ser visto directamente para el pozo somero con el potencial $V(r) = -v_0\delta(r)$ pues

$$\left| \int_0^\infty dr v_0\delta(r)r \right| = v_0 \int_0^\infty dr \delta(r)r \longrightarrow 0^+,$$

y por lo tanto $E \longrightarrow 0^-$.

un pozo en 2D, en sustitución de (3.4). La interacción llegará al límite δ con la Ec. (3.22) llevada al límite $a \rightarrow 0$, es decir

$$\lim_{a \rightarrow 0} V_a(r) \equiv -v_0(a) \delta(\mathbf{r}) \quad (3.23)$$

de modo que la intensidad del potencial delta $v_0(a) > 0$ será ahora

$$\begin{aligned} v_0(a) &= - \int d^2\mathbf{r} V_a(r) \\ &= - \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{\ln|a/a_0|} \xrightarrow{a \rightarrow 0} 0^+, \end{aligned} \quad (3.24)$$

cumpliendo así con el requerimiento dado en [46], donde se tiene $(\ln|a/a_0|)^{-1}$; i. e., decae logarítmicamente a cero.

Partiremos de la Ec. de Schrödinger (3.6) con el potencial (3.22) y buscaremos los estados $E \equiv -|E| < 0$ para ondas s , puesto que nos interesa el valor mínimo de energía de ligadura; en [46] se menciona que el carácter de alcance cero de la interacción delta hace suponer que sólo las ondas s la notarán. Nótese en (3.22) que $\lim_{a \rightarrow 0} V_a(r) = 0^-$, como se indica en [46], indicando que el potencial atractivo será infinitesimalmente débil en el límite δ . Esto sugiere usar el tratamiento ya citado de [43] para un pozo *somero*. Por lo tanto introduciremos (3.22) en (3.20) para obtener, en el límite $a \rightarrow 0$, un único estado ligado de onda s , a saber

$$E = - \frac{\hbar^2}{ma_0^2} \equiv -B_2, \quad (3.25)$$

donde $B_2 \geq 0$ es la energía de amarre de un par de partículas en el vacío que corresponde a la interacción δ -regularizada. La magnitud de $B_2 \equiv -E \propto a_0^{-2}$, varía en el intervalo $(0, \infty)$, y estará completamente determinada si consideramos que nuestra *escala* a_0 se mantiene fija⁴. Será correcto hablar de un apareamiento de Cooper mientras el tamaño de los dímeros sea suficientemente pequeño.

Ahora bien, para la correspondiente regularización del potencial en 3D que cumple con los requerimientos dados en [46] consideraremos el potencial atractivo

$$V_a(r) = - \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{a_0^2} + \frac{3}{a^2} \right) \theta(a-r) \quad (3.26)$$

⁴este parámetro juega el mismo papel que la conocida Λ en cromodinámica cuántica

para el cual la interacción δ se obtiene igualmente con el límite (3.24) en donde

$$\begin{aligned} v_0(a) &= - \int d^3\mathbf{r} V_a(r) \\ &= \frac{4\pi\hbar^2}{m^*} \left(\frac{a^3}{3a_0^2} + 3a \right) \xrightarrow{a \rightarrow 0} 0^+ \end{aligned} \quad (3.27)$$

que se desvanece en $a \rightarrow 0$ como es requerido. Observemos que en (3.26) también se cumple $\lim_{a \rightarrow 0} V_a(r) = 0^-$, es decir, el pozo es también somero y por lo tanto tomaremos Ka y $ka \ll 1$ en (3.9) con las aproximaciones de [44], págs. 726 y 734 $j_0(x) \xrightarrow{x \ll 1} 1$, $j_1(x) \xrightarrow{x \ll 1} x/3$; y $k_0(x) \xrightarrow{x \ll 1} 1/x$; $k_1(x) \xrightarrow{x \ll 1} -1/x^2$ para hallar, usando (3.26) en la Ec. de Schrödinger (3.6) en 3D y tomando el límite δ , i. e., con el potencial $-v_0(a)\delta(\mathbf{r})$, un único estado ligado de onda s , idéntico al caso (3.25) en 2D. De hecho, de antemano hemos adecuado la forma del potencial de regularización (3.26) precisamente con este propósito.

En la Tabla 3.2 resumimos los resultados obtenidos para los pozos con interacción atractiva delta $-v_0\delta(\mathbf{r})$ que poseen un único estado ligado de dos partículas; como hemos visto, en 2D y 3D lo anterior se consigue mediante una regularización de los potenciales δ .

d	$V_a(r) \xrightarrow{a \rightarrow 0} -v_0\delta(\mathbf{r})$	$v_0 \equiv - \int d^d\mathbf{r} V_a(r)$	$B_2 \equiv -E$
1	$-V_0\theta(a-r)$ ($V_0a < \infty$) $V_0 \rightarrow \infty$	$2aV_0 = \text{const.}$	$\frac{mv_0^2}{4\hbar^2}$
2	$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{2}{a^2 \ln a/a_0 } \theta(a-r)$	$-\frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{\ln a/a_0 } \xrightarrow{a \rightarrow 0} 0^+$	$\frac{\hbar^2}{ma_0^2}$
3	$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{a_0^2} + \frac{3}{a^2} \right) \theta(a-r)$	$\frac{4\pi\hbar^2}{m^*} \left(\frac{a^3}{3a_0^2} + 3a \right) \xrightarrow{a \rightarrow 0} 0^+$	$\frac{\hbar^2}{ma_0^2}$

Tabla 3.2: Resumen de los resultados para los problemas d -dimensionales con potenciales de interacción δ (1D) y δ -regularizados (2D y 3D). Aquí $m^* \equiv m/2$.

Los potenciales de regularización δ dependen de dos parámetros: a , que es un regulador de corta distancia y a_0 que representa una escala de la interacción. Con el fin de clarificar su significado físico, veamos que al introducir estos potenciales en la Ec. de Schrödinger para una partícula en un pozo cuántico, estos parámetros pueden identificarse con la coordenada radial del pozo y con la extensión de la función de onda de la partícula, respectivamente. La Fig. 3.5 ilustra lo anterior. Como hemos visto, la magnitud del estado ligado B_2 en 2D y 3D depende de a_0 , parámetro al que hemos llamado la escala o *alcance* de la interacción.

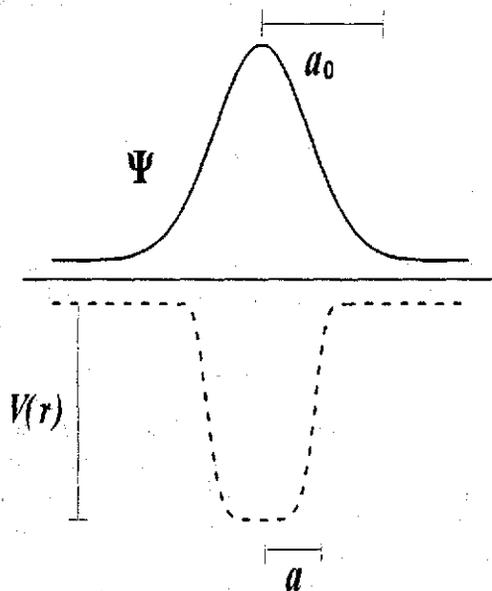


Figura 3.4: Se muestra esquemáticamente el significado físico de los dos parámetros de los potenciales de regularización, a_0 en la función de onda (curva llena), y a en la extensión del pozo (discontinua), desde el punto de vista del problema reducido, Ec (36), de una partícula de masa $m^* = m/2$ en un pozo cuántico llevado al límite δ .

Capítulo 4

Apareamiento en 2D y transición BCS-Bose

4.1 modelo de interacción Nozières y Schmitt-Rink

El problema de la transición o “crossover” entre la superconductividad BCS y la condensación Bose-Einstein ha sido ampliamente estudiado al menos desde el año de 1967 [47]. En materia condensada el regimen BCS de pares de Cooper extendidos que se traslapan y el regimen de pares bosónicos fuertemente ligados y localizados son claramente diferentes; la transición entre ambos ha sido estudiada [48] en 3D con un modelo de interacción enteramente dentro del marco definido por el modelo BCS del Capítulo 2. En su formulación más explícita [49], se enfatiza la importancia vital de la *triple* autoconsistencia entre las ecuaciones de número y *gap* con la energía del estado de una partícula. A continuación veremos cómo esta transición es puesta de manifiesto, de manera exacta en 2D, en un sistema con interacciones interfermiónicas atractivas una vez que la magnitud de éstas (y/o la densidad) es modulada (reducida) adecuadamente.

Para un sistema de N fermiones [11], pág. 8, la ecuación para el número de partículas es

$$N = 2 \sum_k v_k^2, \quad (4.1)$$

donde se ha considerado la degeneración de partículas con espín 1/2 y $v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_k - \mu}{E_k} \right)$ es la probabilidad de que un par exista con

$E_k^2 = \xi_k^2 + \Delta_k^2$, la energía de una cuasipartícula (bogolón) con energía mínima Δ_k , la función de brecha BCS, y donde $\xi_k \equiv \epsilon_k - \mu$ es la energía cinética referida al potencial químico, μ , que será determinado más adelante, pues a diferencia de otros tratamientos o generalizaciones de BCS, aquí *no se considera fijo*, ni es sustituible con la energía de Fermi E_F .

En la ecuación de *gap* BCS dada en [11] para Δ_k

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{kk'} v_{k'} \sqrt{1 - v_{k'}^2}, \quad (4.2)$$

tomaremos

$$V_{kk'} = \begin{cases} -v_0/L^2 & \text{máx}\{0, \mu - \hbar\omega_D\} < \epsilon_{k_{1,2}} \leq \mu + \hbar\omega_D \\ 0 & \text{en caso contrario,} \end{cases} \quad (4.3)$$

donde $v_0 > 0$ será tomada más adelante para la interacción $-v_0\delta(\mathbf{r})$ de la Tabla 3.2. Anotemos que, históricamente, la energía de corte $\hbar\omega_D$ fue establecida en la teoría BCS simplemente para determinar la región donde se espera que la interacción entre los electrones sea atractiva. No obstante, recordemos que, en general, la densidad de estados fonónicos

$$\rho(\omega) \propto \begin{cases} \text{const.} & 1\text{D} \\ \omega & 2\text{D} \\ \omega^2 & 3\text{D} \end{cases},$$

de modo que en 2D la energía de Debye correspondiente estará "corrida" respecto a 3D, mientras que en 1D *todas* las excitaciones fonónicas del sólido resultan igualmente importantes. Esto último es tomado en cuenta en nuestro modelo en el límite inferior en (4.3), el cual se ha escogido de modo que, como un caso *especial* de las Ecs. BCS, podamos tomar $\hbar\omega_D$ como ∞^1 . Ahora, como no puede haber excitaciones infinitas, lo anterior implica simplemente que estamos interesados en *todos* los electrones, y no solamente en los que se encuentren dentro de la franja $\pm\hbar\omega_D$ al rededor de E_F .

Por otra parte, tomar $\hbar\omega_D \rightarrow \infty$ corresponde justamente al límite de interacción δ . Lo anterior se corrobora en la Ref. [50] de la siguiente manera: escribamos una interacción interfermiónica general

$$V_{k,k'} = -(v_0/L^2) g_k g_{k'} \quad (4.4)$$

donde, como antes, L es la longitud del sistema, $v_0 \geq 0$ es la intensidad de la interacción y tomamos $g_k = (1 + k^2/k_0^2)^{-1/2}$ con k_0 el inverso de la

¹ este límite nos remite a aquel de muy baja densidad o densidad cero del gas de electrones, es decir, cuando $E_F \rightarrow 0$, pues $\nu \equiv \hbar\omega_D/E_F \rightarrow \infty$ en ambos casos.

extensión del potencial; $k_0 = k_F$ nos remite a una interacción del orden del espaciamiento interfermiónico. Mientras tanto, la interacción de contacto $V(\mathbf{r}) = -v_0\delta(\mathbf{r})$ estará dada por $k_0 \rightarrow \infty$, que implica $g_k = 1$ con lo cual (4.4) corresponde a (4.3) en la región donde $V_{k,k'} \neq 0$. De hecho, dicha región se puede representar en (4.4) con

$$g_k = \theta(\hbar\omega_D + \mu - \epsilon_k) \theta(\max\{0, \mu - \hbar\omega_D\} + \epsilon_k), \quad (4.5)$$

donde $\theta(x)$ es una función escalón. Claramente se ve en (4.5) que el límite $\hbar\omega_D \rightarrow \infty$ implica $g_k = 1$, i. e., el caso de la interacción δ .

Por otra parte, como se apuntó después de (2.20), Δ_k depende de $V_{kk'}$, pero notemos sin embargo que con la interacción modelo BCS, en el límite δ de la interacción (4.3), se puede tomar $\Delta_k \simeq \Delta$, de la misma manera que para un gas diluido en [39].

En 2D la Ec. de número (4.1) es²

$$N = 2g \int_0^\infty d\varepsilon \left(1 - \frac{\varepsilon - \mu}{[(\varepsilon - \mu)^2 + \Delta^2]^{1/2}} \right) \quad (4.6)$$

de manera exacta, debido a que la densidad de estados electrónica por estado de espín $g = mL^2/2\pi\hbar^2$ es una constante, como ya se indicó en (2.15).

Consecuentemente, usando (4.3) en el límite δ ($a \rightarrow 0$) en (4.2) tenemos, en 2D

$$1 = -\frac{v_0}{2L^2} g \int_0^\infty \frac{d\varepsilon}{[(\varepsilon - \mu)^2 + \Delta^2]^{1/2}} \quad (4.7)$$

Recordemos que el sistema bidimensional permite un tratamiento analítico; de modo que al resolver simultáneamente las Ecs. (4.6) y (4.7) tenemos

$$\begin{cases} 2E_F = \lim_{a \rightarrow 0} \int_{-\mu}^{B_2(a_0/a)^2/2 \rightarrow \infty} d\xi \left(1 - \frac{\xi}{[\xi^2 + \Delta^2]^{1/2}} \right) \\ 1 = -\lim_{a \rightarrow 0} \frac{v_0}{2L^2} g(\varepsilon) \int_{-\mu}^{B_2(a_0/a)^2/2 \rightarrow \infty} \frac{d\xi}{[\xi^2 + \Delta^2]^{1/2}}, \end{cases} \quad (4.8)$$

donde, usando $N = 2gE_F$, hemos sustituido E_F en (4.6) y en el límite superior de integración hemos introducido $B_2 = \hbar^2/ma_0^2$, la energía de

² con $\hbar\omega_D \rightarrow \infty$ realizamos la sustitución $\int_{\max\{0, \mu - \hbar\omega_D\}}^{\mu + \hbar\omega_D} d\varepsilon \xrightarrow{\hbar\omega_D \rightarrow \infty} \int_0^\infty d\varepsilon$.

amarre de un par³ en el vacío (3.25) referida al potencial químico μ ; la forma funcional de este límite superior se ha escogido de manera que se cumpla $B_2 (a_0/a)^2/2 \rightarrow \infty$ en el límite δ . Resolviendo analíticamente (4.8) tenemos

$$\begin{cases} 2E_F = \lim_{a \rightarrow 0} \left[\xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \right]_{-B_2(a_0/a)^2/2}^{-\mu} \\ -1 = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{\ln \left[\xi + \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \right]_{B_2(a_0/a)^2/2}^{-\mu}}{\ln [a/a_0]} \end{cases}, \quad (4.9)$$

donde se ha sustituido v_0 en 2D de (3.24) y $g = mL^2/2\pi\hbar^2$. Calculando los límites⁴ correspondientes y resolviendo simultáneamente estas ecuaciones para Δ y μ , tenemos, de manera *exacta*

$$\begin{cases} \Delta = \sqrt{2B_2E_F} \\ \mu = E_F - B_2/2, \end{cases} \quad (4.10)$$

como había sido hallado primeramente en [38] para un líquido de Fermi *degenerado* y posteriormente en [39] sin necesidad de especificar la interacción involucrada al usar la matriz de dispersión t y relacionarla con una longitud de dispersión de onda. Las dos incógnitas de las Ecs. (4.10) dependen de un solo parámetro adimensional, B_2/E_F . Nótese en los límites de integración de las Ecs. (4.6) y (4.7), que todos los fermiones del sistema interactúan.

4.2 energía de condensación

A partir de (2.16), el Hamiltoniano reducido H_{red} ⁵ BCS, en [7, Eqn. (2.41)] se calcula en (2.26) y (2.27) la energía de condensación del sistema como la diferencia entre energías de las fases normal y superconductor para la interacción (2.9). Como hemos dicho antes en este capítulo, en nuestras ecuaciones tipo BCS con el potencial δ se puede tomar el límite superior de integración $\hbar\omega_D \rightarrow \infty$, con lo cual, en la Ec. (2.26), tendremos

³ la energía de amarre por partícula ligada es $\frac{1}{2}B_2$

⁴ usamos $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\ln |x^{-m} + \sqrt{x^{-2m} + A}|}{\ln |x^n|} = -\frac{m}{n}$, con $A, m, n \in \mathbf{R}$

⁵ H_{red} se construye tomando en cuenta que usando los operadores de creación-aniquilación de un par b_k^\dagger, b_k , el producto $2b_k^\dagger b_k$ toma el lugar de los operadores de número $n_{k\uparrow} + n_{k\downarrow}$ de modo que estos operadores son *el doble* del número de ocupación de un estado, pues se supone que un electrón solitario no puede ocupar un estado-par ocupado

$\sqrt{1 + (\Delta/\hbar\omega_D)^2} = 1 + \frac{1}{2}(\Delta/\hbar\omega_D)^2 + O[(\Delta/\hbar\omega_D)^4]$, y llegamos en 2D a

$$E_s - E_n = -\frac{1}{2}g\Delta^2 \quad (4.11)$$

$$= -\frac{1}{2}NB_2 = -N_B(0)B_2, \quad (4.12)$$

donde $g = mL^2/2\pi\hbar^2$ y en (4.11) tenemos la libertad de tomar la igualdad si en adelante despreciamos los términos $O[(\Delta/\hbar\omega_D)^4]$. En (4.12) hemos usado (4.10) y hemos supuesto que el número de pares formados $N_B(0) \equiv N/2$, lo que nos dice que $E_s - E_n$ es la energía de un gas ideal de $N_B(0)$ partículas compuestas o dímeros con energías de amarre B_2 , como se ilustra en la Fig. 4.1.

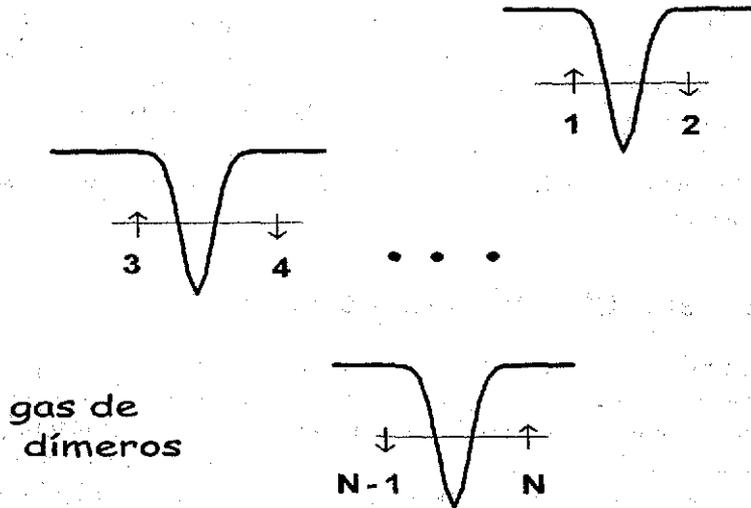


Figura 4.1: Imagen de un gas de dímeros formados cada uno a partir del único estado ligado de un pozo δ -regularizado. Con este potencial se evita el colapso del sistema de N fermiones pues a lo más habrá dos partículas ligadas en un pozo.

4.3 Fracción de electrones apareados

4.3.1 modelo estadístico binario

El criterio de cercanía en el espacio de energías entre los electrones del sólido define un subconjunto del total de electrones en el gas que son *apareables* y que, eventualmente, podrán estar *apareados*. A continuación resumimos los resultados del modelo estadístico binario de la Ref. [51], donde se toma un gas con un número total de fermiones $N = N_1 + N_2$, expresado simplemente como la suma de los N_1 no-interactuantes (que obedecen la distribución estadística Fermi-Dirac, con potencial químico μ) más los N_2 fermiones *apareables*, i.e., aquellos que están dentro del cascarón de interacción de ancho $\hbar\omega_D$ alrededor de la superficie de Fermi ($\mu \simeq E_F$ a bajas temperaturas), de modo que

$$N_2 = 2 \int_{\mu - \hbar\omega_D}^{\mu + \hbar\omega_D} \frac{g(\varepsilon) d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} = 2g(\mu) \hbar\omega_D \quad (4.13)$$

donde $\beta \equiv 1/k_B T$ con k_B la constante de Boltzmann y T la temperatura del gas. Los N_2 fermiones *apareables* se toman como una mezcla ideal en equilibrio químico de $N_{2,0}(T)$ fermiones no apareados y $N_B(T)$ pares de fermiones *rompibles* con energías $\varepsilon_{B,K}(T) = 2\mu_2(T) - \Delta_K(T) \geq 0$, donde Δ_K es la energía de amarre del par,

$$N_2(T) = N_{2,0}(T) + 2N_B(T) \quad (4.14)$$

$$= N_{2,0}(T) + 2[N_{B,0}(T) + N_{B,0 < K < K_0}(T)] \quad (4.15)$$

donde $N_{B,0}(T)$ es el número de pares bosónicos *condensados*, i. e., con momento del centro de masa $K = 0$ y $N_{B,0 < K < K_0}(T)$ es el número de pares *excitados* con momentos $0 < K < K_0$ para los cuales $\Delta_{K_0 \geq 0} \equiv 0$. El gran potencial para este sistema [51] $\Omega_2 = F_2 - \mu_2 N_2$ con F_2 la energía libre de Helmholtz, es minimizado respecto a la probabilidad de ocupación $n_2(\varepsilon)$ de los fermiones para dar

$$n_2(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu_2)} + 1}, \quad (4.16)$$

es decir, una distribución térmica Fermi-Dirac *con potencial químico* μ_2 . De modo que el número total de fermiones *apareables* pero no apareados en 2D es [51]

$$N_{2,0}(T) = 2 \int_{\mu - \hbar\omega_D}^{\mu + \hbar\omega_D} d\varepsilon n_2(\varepsilon) g(\varepsilon) = 2 \int_{\mu - \hbar\omega_D}^{\mu + \hbar\omega_D} d\varepsilon \frac{g(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon - \mu_2)} + 1} \quad (4.17)$$

Como en 2D la densidad de estados es constante la ecuación anterior se convierte en la expresión exacta

$$N_{2,0}(T) = \frac{2g}{\beta} \ln \left[\frac{1 + e^{-\beta(\Delta_0(T)/2 - \hbar\omega_D)}}{1 + e^{-\beta(\Delta_0(T)/2 + \hbar\omega_D)}} \right] \quad (2D), \quad (4.18)$$

donde la energía de amarre $\Delta_0(T) = 2[\mu(T) - \mu_2(T)]$ es obtenida al minimizar Ω_2 respecto a $N_{B,0}(T)$ ⁶. De (4.14) el número total de pares de fermiones formados $N_B(T) = \frac{1}{2}[N_2(T) - N_{2,0}(T)]$ por lo que usando (4.18) la fracción de electrones apareados en N_B bosones es

$$2n_B/n_2 \equiv 2N_B/N_2 = \left[1 - \frac{1}{\beta\hbar\omega_D} \ln \left[\frac{1 + e^{-\beta(\Delta_0(T)/2 - \hbar\omega_D)}}{1 + e^{-\beta(\Delta_0(T)/2 + \hbar\omega_D)}} \right] \right] \quad (2D) \quad (4.19)$$

En la Fig 4.2, tomada de [51], se muestra esta fracción $2N_B/N_2 \equiv 2n_B/n_2$ donde $n_B \equiv N_B/L^2$ y $n_2 \equiv N_2/L^2$ de estados *apareados* respecto a los N_2 *apareables* (4.19) como función del acoplamiento λ para distintos valores de T/T_F . En $T = 0$, $2N_B/N_2 = 1$ para $\lambda \geq 2.89$; en todas las curvas de $T > 0$ esta fracción aumenta con λ y se aproxima asintóticamente a la unidad de manera más lenta a medida que aumentan los valores del parámetro adimensional T/T_F , que para los superconductores cupratos de [29] está entre 0.01 y 0.06, y depende en general de la T del cuprato.

Sin embargo, no todos los fermiones son apareables. La densidad de estados electrónicos (por espín), generalizada a d dimensiones, es $g(\varepsilon) = (m/2\pi\hbar^2)^{d/2} L^d e^{d/2-1} / \Gamma(d/2)$, y hasta el nivel de Fermi se tienen, de [52], $N = (Lk_F)^d / 2^{d-2} \pi^{d/2} d \Gamma(d/2)$ fermiones. Si todos los fermiones apareables estuvieran apareados $N_B = g(E_F) \hbar\omega_D$ y tendríamos

$$2n_B/n \equiv 2N_B/N = d\hbar\omega_D/2E_F \equiv \nu d/2 \ll 1, \quad (4.20)$$

donde $n \equiv N/L^2$, pues típicamente $\nu \equiv \hbar\omega_D/E_F \ll 1$.

4.3.2 En el modelo BCS

Se afirma comunmente [9], pág. 401, que la fracción de todos los fermiones apareados es proporcional a Δ/E_F . Mientras tanto, la fracción de electrones *apareables* es proporcional a $\hbar\omega_D/E_F$. Recordemos que hemos visto en (4.12) que si todos los fermiones que interactúan están apareados la energía de condensación en $T = 0$ corresponde a la de $N/2 = N_B(0)$ dímeros con energías de amarre B_2 . Ahora bien, la ecuación (2.32) de [7] indica que

⁶resultado válido únicamente en el intervalo $0 \leq T \leq T_c$ donde $N_{B,0}(T)$ es una fracción significativa de $N_B(T)$

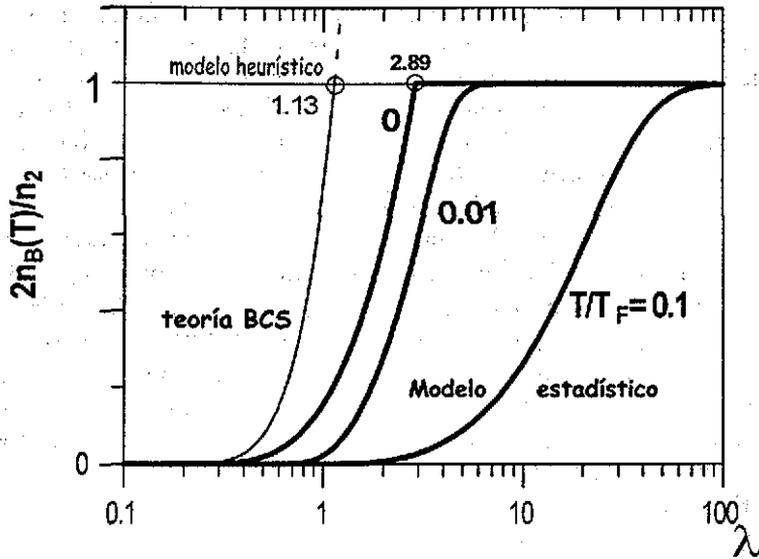


Figura 4.2: Fracción de electrones apareados en bosones para distintos valores de T/T_F como función del acoplamiento λ , según el modelo estadístico binario de equilibrio químico y térmico de la Ref. [51]. La curva delgada reproduce la expresión BCS $[\sinh(1/\lambda)]^2$ para $T = 0$. Las líneas gruesas ilustran la fracción (4.19) dentro del modelo estadístico de primeros principios

ahí se acepta tácitamente que todos los electrones apareables están apareados, al menos para acoplamientos débiles. Sin embargo, si la fracción de los electrones apareables que se encuentran apareados es proporcional a $\Delta/\hbar\omega_D = [\sinh(1/\lambda)]^{-1}$ en BCS, esta fracción es igual a la unidad únicamente para $\lambda \simeq 1.13$. Por otra parte, según Blatt en [53], pág. 128, en general, debido a que los estados ligados se deben a correlaciones de dos partículas, la probabilidad de que un estado-par esté ocupado será proporcional al producto de las probabilidades individuales de cada partícula; por lo tanto la fracción de estados ligados posibles de dos partículas es

$$f = \left(\frac{\tau}{E_F} \right)^2, \quad (4.21)$$

donde τ es el parámetro respecto a E_F que determina la magnitud de la región o franja de estados (de una partícula) disponibles. En la teoría BCS

se identifica τ con $\hbar\omega_D$. Notemos primeramente que de acuerdo a [53] la probabilidad de que existan estados ligados de más partículas es mucho menor. Se puede discernir entre las fracciones de electrones *apareables* y los *apareados* usando, respectivamente, las fracciones $\hbar\omega_D/E_F$ y Δ/E_F . De esta forma, siguiendo a Blatt, por una parte la fracción de estados *apareables* es del orden de $(\hbar\omega_D/E_F)^2$ y como típicamente $\hbar\omega_D \ll E_F$, esta fracción es ya de hecho una cantidad muy pequeña, como se anotó también después de (4.20). Mientras tanto, la fracción estados *apareados* es del orden de $(\Delta/E_F)^2$ y, por consiguiente, la fracción de *apareables* que están *apareados* es proporcional a $(\Delta/\hbar\omega_D)^2$. Al usar (2.23) en la anterior, para $T = 0$, tenemos esta fracción como $[\sinh(1/\lambda)]^{-2}$, de nuevo con valor uno únicamente para $\lambda = 1.13$. Más aún, para valores de λ mayores, la fracción de apareables respecto a apareados quedaría por encima de la unidad: este razonamiento ya no tiene sentido pues a lo más todos los *apareables* estarían apareados.

En cuanto a nuestro modelo bidimensional de interacción δ , considerando primero $B_2 \ll E_F$ en (4.10) tenemos $\Delta \ll E_F$, lo cual determina que la fracción de partículas apareadas respecto al total sería ya $\ll 1$ como en (4.20). No obstante, en el caso particular de la interacción δ -regularizada todas las partículas del sistema en (4.12) son apareables pues al escribir la Ec. (4.13) de electrones apareables con los límites del modelo de interacción (4.3) tendremos

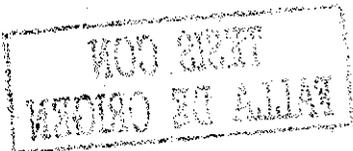
$$N_2 = 2 \int_{\max\{0, \mu - \hbar\omega_D\}}^{\mu + \hbar\omega_D} \frac{g(\varepsilon) d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1}$$

$$\xrightarrow{\hbar\omega_D \rightarrow \infty} 2 \int_0^{\infty} \frac{g(\varepsilon) d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} + 1} = N \quad (4.22)$$

Por otra parte, si los N fermiones estuviesen apareados ($N_B(0)/N = 1/2$), usando las Ecs. (4.10) y manteniendo la fracción de *apareados* $\sim (\Delta/E_F)^2 = 2B_2/E_F = 1^7$, lo cual al usar (3.25) implicará que la escala de la interacción $a_0 \sim k_F^{-1}$; tomando $T_F = 10^4$ K, tenemos $a_0 \sim 10^{-10}$ m, una magnitud del orden del espaciamiento entre los electrones.

No obstante, recordemos que, en general, en (3.25) la escala a_0 es arbitraria. En principio, necesitamos una condición de *normalización* para fijarla. Una posibilidad es fijar la magnitud del estado ligado, que parametriza el sistema en el límite δ . Lo anterior nos permite hablar de pares "localizados" en espacio real, como los mencionados en [53], Secc. III, en contraste el régimen BCS, donde los pares de Cooper resultan *extendidos*.

⁷ el caso del modelo heurístico de la Fig. 4.2, donde a lo sumo todos los fermiones apareables eventualmente estarán apareados.



Capítulo 5

Relación de dispersión de los pares en 2D

5.1 Ecuación de Cooper con $K > 0$

Los cálculos de la teoría BCS para el estado base se refieren a pares de Cooper en reposo. Sin embargo, es de suponer que, como una consecuencia de la interacción electrón-fonón, las propiedades de los electrones serán modificadas; en particular su relación de dispersión. Los pares de Cooper con momento del centro de masa $\mathbf{K} \neq 0$ son tratados en la Ref. [23] como *parones*, que tienen una distribución térmica de Bose, pero no cumplen con las reglas usuales de conmutación para bosones [41], y por tanto son considerados como cuasi-bosones. Estos parones deben distinguirse de los pares de Cooper que tienen valores definidos tanto de \mathbf{K} como de \mathbf{k} . En este capítulo tomaremos un par de Cooper como un par de fermiones ligados, con momentos justo por encima del nivel de Fermi, donde residen los $N - 2$ fermiones *espectadores* del sistema de N fermiones; un parón tiene vectores de onda asociados \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 , que dan lugar al vector de onda $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$.

Tomemos dos fermiones con energías $\varepsilon_{\mathbf{k}} \equiv \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$ sobre el mar de Fermi, con m su masa efectiva, interactuando vía el potencial BCS mostrado en (2.9). Escribiendo la Ec. (2.14) de Cooper [6] para los eigenvalores $E_K \equiv 2E_F - \Delta_K$, donde $\Delta_K > 0$ es la energía de amarre para un par

$$1 = V \sum_{\mathbf{k}} [2\varepsilon_{\mathbf{k}} - 2E_F + \Delta_K + \hbar^2 K^2 / 4m]^{-1}, \quad (5.1)$$

donde $\hbar \mathbf{K} = \hbar(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)$ es el momento del centro de masa del par, $\hbar \mathbf{k}$ es el momento relativo, y, de [11], pág. 28 y [54], con $\hbar \omega_D \equiv \hbar^2 k_D^2 / 2m$, la prima

sobre la sumatoria denota las siguientes condiciones sobre los momentos

$$k_F < k_1 \equiv \left| \mathbf{k} + \frac{1}{2} \mathbf{K} \right| < (k_F^2 + k_D^2)^{1/2} \quad \text{y} \quad k_F < k_2 \equiv \left| \mathbf{k} - \frac{1}{2} \mathbf{K} \right| < (k_F^2 + k_D^2)^{1/2} \quad (5.2)$$

que aseguran que el par de fermiones está por encima del nivel de Fermi y restringen la suma sobre \mathbf{k} para una \mathbf{K} dada.

La relación de dispersión de un par excitado con $K > 0$

$$\varepsilon_K \equiv \Delta_0 - \Delta_K \geq 0, \quad (5.3)$$

en la cual interviene la energía de amarre para un par con $K = 0$, $\Delta_0 = 2\hbar\omega_D (e^{2/\lambda} - 1)^{-1} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 2\hbar\omega_D e^{-2/\lambda}$, y $\lambda = g(E_F)V$ con $g(E_F)$ la densidad de estados por espín que, como se ha dicho, es una constante $g = mL^2/2\pi\hbar^2$ en 2D. Recordemos que Δ_0 en la Ec. (2.14), es obtenida en el problema de Cooper, cuyo eigenvalor para el par ligado es simplemente $2E_F - \Delta_0$.

La posibilidad de que los pares de Cooper tengan una relación de dispersión *lineal*, en vez de cuadrática, fue mencionada por Schrieffer en 1964 en la Ref. [8], p. 33, para el modelo de interacción BCS en 3D. Por otra parte, como se mencionó en la Sección 2.3, un sistema en 2D de *bosones* con relación de dispersión *lineal* hace posible una CBE.

Recordemos que la relación de dispersión del par se asume casi siempre cuadrática en estudios de superconductividad. Sin embargo, como veremos a continuación, la expresión para la relación de dispersión del par es lineal para los momentos del centro de masa (CM) $K \ll 1$ del par [23], y deberá usarse explícitamente esta relación con el fin de calcular la temperatura crítica T_c .

5.1.1 Interacción δ

La relación de dispersión ε_K se obtiene en 2D en [50] a partir del potencial (4.4) en el límite $\delta (g_p = 1)$

$$\varepsilon_K = \frac{2}{\pi} \hbar v_F K + \left[1 - \left\{ 2 - \left(\frac{4}{\pi} \right)^2 \right\} \frac{E_F}{B_2} \right] \frac{\hbar^2 K^2}{4m} + O[K^3] \quad (5.4)$$

cuyo término lineal predomina para $K \ll 1$, mientras que el término cuadrático depende del parámetro E_F/B_2 , con B_2 energía de amarre del par y tiene un comportamiento divergente en el límite de amarre débil $B_2 \ll E_F$, a pesar de que esta ecuación ha permitido obtener resultados exactos y finitos, mostrados en [50], Fig. 1. Recordemos que una ε_K infinita indicaría una masa reducida cero. Sin embargo, la utilidad de un

desarrollo como (5.4) puede ser vista como la de las series asintóticas. Como es sabido, [44], págs. 378, las series asintóticas son series de la forma $\sum a_n x^{-n}$ divergentes para cualquier valor de la variable; no obstante¹, para valores suficientemente grandes de ésta (que en 5.4 equivale a tomar $K \ll 1$) *cortar la serie oportunamente*, i. e., tomando sumas parciales de unos cuantos términos, da una buena aproximación de la función, incluso con la precisión que se desee. La serie de ε_K en (5.4) será una de estas series asintóticas siempre y cuando [44] su residuo cumpla

$$\begin{aligned} \lim_{K \rightarrow 0} \left(\frac{1}{K}\right)^n O[K^n] &= 0, \text{ para } n \text{ fija, y} \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{K}\right)^n O[K^n] &= \infty, \text{ para } K \text{ fija.} \end{aligned} \quad (5.5)$$

5.1.2 Interacción BCS

La Ec. (5.1) en 2D se puede escribir [54] de manera exacta para la incógnita $\Delta_\kappa \equiv \Delta_K/E_F$ con $\kappa \equiv K/2(k_F^2 + k_D^2)^{1/2}$ como la doble integral adimensional

$$1 = \frac{4}{\pi} \lambda \int_0^{\pi/2} d\phi \int_{l_i(\nu, \phi)}^{l_s(\nu, \phi)} d\xi \xi [\tilde{\Delta}_\kappa + 2(1+\nu)\kappa^2 - 2 + 2\xi^2]^{-1}, \quad (5.6)$$

donde $\xi \equiv k/k_F$, $\nu \equiv \hbar\omega_D/E_F = k_D^2/k_F^2$ y en los límites de integración las funciones $l_s(\nu, \phi) = [(1+\nu) - \kappa^2(1+\nu)\sin^2\phi]^{1/2} - \kappa(1+\nu)^{1/2}\cos\phi$ y $l_i(\nu, \phi) = [1 - \kappa^2(1+\nu)\sin^2\phi]^{1/2} + \kappa(1+\nu)^{1/2}\cos\phi$ han sido determinadas por las condiciones (5.2). A partir de la ecuación anterior se obtiene una solución en serie para $\tilde{\Delta}_\kappa$,

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}_\kappa &= \frac{2\nu}{e^{2/\lambda} - 1} - \frac{8}{\pi} (1+\nu)^{1/2} \frac{(1+\nu)^{1/2} + e^{2/\lambda}}{e^{2/\lambda} - 1} \kappa \\ &\quad + 2(1+\nu) \left[\left(\frac{8}{\pi^2} - 1 \right) e^{-2/\lambda} \frac{(1+\nu) - e^{4/\lambda}}{\nu} - 1 \right] \kappa^2 + O(\kappa^3) \\ &\equiv \tilde{\Delta}_0 + \tilde{\Delta}_1 + \tilde{\Delta}_2 \kappa^2 + O(\kappa^3) \end{aligned} \quad (5.7)$$

de la cual, usando $E_F = \hbar^2 k_F^2/2m$ y $v_F = \hbar k_F/m$ tenemos

$$\begin{aligned} \Delta_K &= \frac{2\hbar\omega_D}{e^{2/\lambda} - 1} - \frac{2}{\pi} \frac{(1+\nu)^{1/2} + e^{2/\lambda}}{e^{2/\lambda} - 1} \hbar v_F K \\ &\quad + (\hbar^2/4m) \left[\left(\frac{8}{\pi^2} - 1 \right) e^{-2/\lambda} \frac{(1+\nu) - e^{4/\lambda}}{\nu} - 1 \right] K^2 + O(K^3) \\ &\equiv \Delta_0 + \Delta_1 K + \Delta_2 K^2 + O(K^3). \end{aligned} \quad (5.8)$$

¹e. g., la serie asintótica de la función $\Gamma(z) = (z-1)!$ que para $z \gg 1$ da en [44] una aproximación correcta, que puede corroborarse con tablas

Usando (5.3) y (5.8) obtenemos una expresión válida para cualquier valor de acoplamiento λ

$$\begin{aligned} \varepsilon_K = & \frac{2(1+\nu)^{1/2} + e^{2/\lambda}}{\pi e^{2/\lambda} - 1} \hbar v_F K \\ & + \left[1 - \left(\frac{8}{\pi^2} - 1 \right) e^{-2/\lambda} \frac{(1+\nu) - e^{4/\lambda}}{\nu} \right] (\hbar^2/4m) K^2 + O(K^3). \end{aligned} \quad (5.9)$$

Para $K \ll 1$ el término dominante es desde luego el término lineal; este hecho se había apuntado ya en las Refs. [8], pág. 33 y [23], pero aquí como en (5.4), con el término lineal seguido del término cuadrático. La relación de dispersión (5.9) debe usarse en una distribución térmica de Bose al considerar la superconductividad como una CBE.

5.2 Límite de baja densidad

Ahora analizaremos la relación de dispersión (5.3) en el límite de muy baja densidad del gas de electrones en el sólido, que corresponde a la desaparición del mar de Fermi ($E_F \rightarrow 0$), i.e., $k_F \rightarrow 0$ ó equivalentemente $\nu \equiv \hbar\omega_D/E_F \rightarrow \infty$. Este límite corresponde por tanto al régimen de Bose (baja densidad de partículas).

En [50] para el caso (5.4) del potencial δ en 2D tenemos para muy baja densidad

$$\lim_{E_F \rightarrow 0} \varepsilon_K = \frac{\hbar^2 K^2}{4m} \quad (5.10)$$

Es decir, el término lineal desaparece mientras que con el cuadrático se recupera la relación de dispersión que corresponde a la energía cinética en el vacío de una partícula o par "local" de masa $2m$ y con momento K .

Por otra parte, en (5.8) tenemos para el término lineal

$$\Delta_1 K \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} -\frac{2}{\pi} \frac{\sqrt{\nu}}{e^{2/\lambda} - 1} \hbar v_F K \equiv -\frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2\hbar^3 \omega_D}{m}} \frac{1}{e^{2/\lambda} - 1} K, \quad (5.11)$$

mientras que el cuadrático

$$\Delta_2 K^2 \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} (\hbar^2/4m) \left[\left(\frac{8}{\pi^2} - 1 \right) e^{-2/\lambda} - 1 \right] K^2 \quad (5.12)$$

de modo que en (5.9)

$$\varepsilon_K \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2\hbar^3 \omega_D}{m}} \frac{1}{e^{2/\lambda} - 1} K + (\hbar^2/4m) \left[1 - \left(\frac{8}{\pi^2} - 1 \right) e^{-2/\lambda} \right] K^2, \quad (5.13)$$

una expresión que depende sólo del acoplamiento λ .

Ahora bien, sería conveniente preguntarnos qué sucede con (5.9) si, manteniendo el límite de baja densidad Ec. (5.13), el acoplamiento es débil, $\lambda \rightarrow 0$. Primeramente, en (5.11) tenemos

$$\Delta_1 K \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} -\frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2\hbar^3 \omega_D}{m}} \frac{1}{e^{2/\lambda} - 1} K \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 0, \quad (5.14)$$

mientras que en (5.12) tenemos

$$\Delta_2 K^2 \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} (\hbar^2/4m) \left[\left(\frac{8}{\pi^2} - 1 \right) e^{-2/\lambda} - 1 \right] K^2 \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} -\frac{\hbar^2 K^2}{4m} \quad (5.15)$$

de modo que (5.14) y (5.15) se implican que en (5.9)

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \varepsilon_K \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \frac{\hbar^2 K^2}{4m}, \quad (5.16)$$

el mismo resultado (5.10) pero con el límite $\lambda \rightarrow 0$ adicional. Tanto (5.10) como (5.16) indican que un par de Cooper con $K \neq 0$ se despalza en el vacío como una partícula *aislada*.

Ahora bien, el orden en que los límites han sido tomados es crucial para llegar a (5.16). Veamos directamente de (5.9), tomando los límites en el orden inverso, el término lineal es

$$\Delta_1 K \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} -\frac{2}{\pi} \hbar v_F K \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} 0 \quad (5.17)$$

de la misma manera que en (5.14) pero ahora el término intermedio daría lugar justamente al término lineal de (5.4); el término cuadrático

$$\Delta_2 K^2 \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \frac{\hbar^2}{4m} \left[\left(1 - \frac{8}{\pi^2} \right) \frac{e^{2/\lambda}}{\nu} - 1 \right] K^2 \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} -\frac{\hbar^2 K^2}{4m} \quad (5.18)$$

al igual que en (5.15) pero aproximándose por la derecha; con lo cual en (5.9) concluiremos, con $0 < \lambda \ll 1$ que

$$\lim_{\lambda \ll 1} \varepsilon_K \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} \frac{\hbar^2 K^2}{4m} \quad (5.19)$$

pues será correcto *sólo* en caso de que en el término intermedio de (5.18)

$$e^{2/\lambda}/\nu \xrightarrow{\lambda \ll 1, \nu \rightarrow \infty} 0 \quad (\lambda \neq 0) \quad (5.20)$$

pues la dependencia en λ prevalece después de tomar el primer límite. Es decir, en el orden en que se han tomado los límites, es necesario puntualizar esta condición dado que el numerador de (5.20) es una función exponencial de λ mientras que el denominador es lineal en ν . Esta es la única razón por que hemos diferenciado (5.16) y (5.19). En la Tabla 5.1 hemos resumido los resultados en los límites analizados tanto para el término Δ_1 como para Δ_2 de la Ec. (5.8). A pesar de la no conmutatividad observada en los límites ahí expuestos, la Tabla 5.1 nos permite afirmar que hemos llegado a la misma conclusión (5.10), respecto a la relación de dispersión para el potencial δ en 2D, que fue obtenida independientemente, salvo la condición adicional (5.20) en nuestro caso. Sin embargo, de antemano se supondría que el orden de los límites no afectara el hecho $\epsilon_K = \hbar^2 K^2 / 4m$, pues es lo que se esperaría físicamente para el par, en el límite de baja densidad. Por tanto consideramos que la relación (5.9) es un desarrollo correcto.

lim	Δ_1	Δ_2
$\nu \rightarrow \infty$	$-\frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{2\hbar^3 \omega_D}{m}} \frac{1}{e^{2/\lambda} - 1}$	$\frac{\hbar^2}{4m} \left[\left(\frac{8}{\pi^2} - 1 \right) e^{-2/\lambda} - 1 \right]$
$\nu \rightarrow \infty$ $\lambda \rightarrow 0$	0	$-\frac{\hbar^2 K^2}{4m}$
$\lambda \ll 1$ $\nu \rightarrow \infty$	0	$-\frac{\hbar^2 K^2}{4m}$
$\lambda \rightarrow 0$	$-\frac{2}{\pi} \hbar v_F$	$\frac{\hbar^2}{4m} \left(1 - \frac{8}{\pi^2} \right) \frac{e^{2/\lambda}}{\nu} - 1$

Tabla 5.1: Resumen de los resultados en límites de muy baja densidad y acoplamiento débil tomados por separado y simultáneamente para los factores lineal y cuadrático de la relación de dispersión de los pares (5.9) con momento del CM $K > 0$.

Capítulo 6

Conclusiones

Hemos visto que un pozo cuántico esféricamente isotrópico en 2D, con una función de potencial $-v_0\delta(r)$, $v_0 > 0$, posee un número infinito de estados ligados, al igual que en 3D, y su estado más ligado es infinitamente ligado. Esto nos imposibilita a utilizar el potencial δ en un gas de N fermiones como modelo de apareamiento en superconductividad, pues se requerirían energías infinitas para formar estados ligados. El sistema se colapsaría con una densidad $n = N/L^d$ y energía de amarre E_0/N por partícula infinitas, $n \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \infty$ y $E_0/N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} -\infty$.

Hemos visto que el tratamiento adecuado de los potenciales δ en 2D y 3D requiere de una regularización – un método común en Teoría Cuántica de Campos. Las regularizaciones de potenciales δ en los pozos rectangulares en 2D y 3D hace que estos se vuelvan pozos infinitamente *someros*, que tienen un solo estado ligado de dos partículas por pozo cuya energía, B_2 , tanto en 2D como en 3D, depende únicamente del valor del parámetro libre a_0 que es una escala del alcance de la interacción. Los pozos δ -regularizados son casos interesantes y sencillos donde, utilizando sólo Mecánica Cuántica básica, hemos obtenido resultados útiles, pues a partir de la interacción regularizada se obtiene información respecto a los estados ligados de dos partículas. Hallamos que esta interacción en particular se evita el colapso del sistema de N fermiones.

Ahora, si en vez del potencial regularizado (3.22) tomamos la expresión $V_\alpha(r) = \hbar^2/2m^* [2/a^2(\ln|a/a_0| + \gamma)] \theta(a - r)$ que se usa en la Ref. [46], la energía de estado ligado B_2 tendría un factor extra que le daría forma exponencial $B_2 = (\hbar^2/2ma_0^2) e^{-2\gamma}$, como en la Ec. (A5) de la Ref. [39], sugiriendo que se podría identificar la segunda de las Ecs. de Miyake (4.10) con la ecuación BCS $\Delta \sim 2E_F e^{-1/\lambda}$.

Un hecho interesante es que la interacción δ regularizada nos ha permi-

tido reproducir de manera analítica y autoconsistente, las Ecs. (4.10) para el gas con interacción de N fermiones en 2D; el sistema queda parametrizado por la energía del estado ligado de una partícula que obtuvimos en el Capítulo 3. Estas ecuaciones son características de un líquido de Fermi degenerado,

i. e., donde los fermiones se encuentran a temperaturas muy por debajo de la temperatura de Fermi. Con las ecuaciones exactas BCS-Bose de Miyake se ilustra la llamada teoría de transición o "crossover" entre los regímenes BCS y Bose, pues en el límite de alta densidad de partículas y/o acoplamiento débil los dímeros tendrán $B_2 \ll E_F$, y por lo tanto el gap $\Delta \ll E_F$, mientras que el potencial químico se reduce a $\mu \simeq E_F$; éste es el régimen BCS de pares que se traslapan. En el otro extremo, para valores de B_2 grandes y/o baja densidad, i. e., $B_2 \gg E_F$, tendremos $\mu \simeq -\frac{B_2}{2}$, que es simplemente la energía de formación de los dímeros "localizados"; éste es el llamado régimen de Bose. Es decir, lo anterior hace posible construir la imagen de la transición BCS-Bose en un sistema que consiste en un gas estable de dímeros formado a partir de un gas de N fermiones con interacción δ regularizada. Las ecuaciones obtenidas son exactas en 2D debido a que la densidad de estados constante permite un tratamiento analítico.

Además, con ayuda de las ecuaciones (4.10) hemos obtenido una expresión para la energía de condensación (4.12) en el límite δ , también en 2D, que corresponde exactamente a la energía de formación de un gas de $N/2$ dímeros con energía de amarre individuales B_2 , donde todos los fermiones están apareados. De este modo se obtiene también fácilmente la Ec. BCS (4.11), válida para cualquier valor de acoplamiento, a diferencia de la Ec. (2.44) de la Ref. [7], válida sólo para $\lambda \rightarrow 0$.

Como hemos anotado, el caso bidimensional es importante para modelar la superconductividad de alta T_c en los cupratos, que pueden ser vistos como sistemas casi bidimensionales y cuyos valores experimentales de T_c están muy por encima de las predicciones de la teoría microscópica estándar BCS. En particular, para los cupratos de HTSC, es necesario considerar los orbitales O- $2p$ y Cu- $3p$, con los cuales debe estimarse un potencial de una partícula que sea razonablemente bueno para escribir una ecuación de Schrödinger local, que a su vez llevaría a una ecuación secular óptima y sencilla del cuprato.

Por otra parte, la Ec. (4.11) es una indicación de que en la teoría BCS, a partir de la construcción del Hamiltoniano reducido, se asume tácitamente que todos los electrones susceptibles de aparearse estarán eventualmente apareados. En el régimen de Bose todos los electrones están apareados. Ahora bien, aun agregando lo propuesto por Blatt, la fracción de electrones *apareables vs. apareados* dentro de la teoría BCS muestra una inconsis-

tencia para acoplamiento $\lambda > 1.13$, pues indicaría que $\Delta > \hbar\omega_D$, i. e., habría electrones apareados *fuera* de la franja de apareamiento. Este modelo contrasta significativamente con el modelo estadístico binario basado en primeros principios de [51] donde en $T = 0$ todos los electrones apareables están apareados para $\lambda = 2.89$, mientras que la fracción de electrones *apareables* que se encuentran *apareados* se aproxima asintóticamente a la unidad para otras curvas de valores de temperatura, como se muestra en la Fig. 4.2.

En cuanto a la relación de dispersión de los pares de Cooper, es importante resaltar que nada impide la existencia de pares excitados ($K \neq 0$), que por tener un número de ocupación indefinido de estados k para un K dado, pueden ser considerados como *cuasibosones* sin alterar el mecanismo de interacción fonónico entre fermiones. Por tanto la Ec. (5.1) resulta una generalización directa de la Ec. de Cooper (2.4). La relación de dispersión en la Ec. (5.9) es obtenida de (5.1); en ella hemos supuesto que los pares son irrompibles, i. e., que no hay un valor K_0 máximo donde los pares dejan de existir. Esto se justifica debido al énfasis que se ha hecho para momentos pequeños $K \ll 1$, donde el término dominante (lineal) es una buena aproximación de ε_K . Más aún, de ser similar un sistema de dímeros como el de la Fig. 4.1 a un gas de Bose, su condensación BE en toda $d > 1$ será posible con una relación de dispersión *lineal* [54] y [23], de estos, o quizá con una cuyo término dominante sea lineal, como en la Ec. (5.9) para 2D. La viabilidad de usar una relación de dispersión tal se ha ejemplificado al tomar el límite $E_F \rightarrow 0$, en el cual, con una relación de dispersión similar para la interacción δ , que fue obtenida independientemente en la Ref. [50], se conoce el resultado (5.10). Nosotros hemos podido reproducir este resultado, en los límites de muy baja densidad y acoplamiento débil, agregando la condición especificadas en (5.20). La Ec. (5.10) indica que los pares de Cooper excitados se propagarían, en el vacío del gas de fermiones, precisamente como cualquier otra partícula *real* e individual. Por tanto, este resultado indica que, en principio, sería posible *detectar* los pares de Cooper experimentalmente como partículas reales. Este es un reto que queda abierto para la física experimental. Además sería conveniente hallar materiales superconductores donde las interacciones sean similares a las δ .

Notemos, además, que muchos de los cálculos que llevamos a cabo en esta tesis, dentro del formalismo de teoría de muchos cuerpos, están dentro del marco definido por la teoría estándar BCS (aclarando, desde luego, que en ella no se hace mención alguna a la bosonización) y los pozos δ han sido tratados en detalle para los estados cuánticos que se ven afectados por esta interacción, de ondas s , típicos en los superconductores metálicos de bajas temperaturas. Esta relativa simplicidad nos ha permitido llegar a resultados fácilmente interpretables. Una motivación extra para seguir por

este camino nos la da el reciente descubrimiento de superconductividades *altas* (39 K)¹ en el compuesto de MgB₂ [55], metálico, donde las teorías tipo BCS con ondas *s* son mucho más cercanas a la realidad e incluso es viable un mecanismo de interacción puramente fonónica.

Por último, es importante resaltar, como se menciona en [27], para el entendimiento de la superconductividad en HTSC, la importancia que tienen superconductividad los modelos teóricos sencillos, "toy models", como el que presenta esta tesis. Al introducir la interacción δ -regularizada hemos podido exhibir el régimen de Bose, con densidades bajas y dímeros localizados, dentro del superconductor.

¹Por cerca de 15 años se había creído que la teoría de superconductividad estándar no predecía nada más allá de unos 40°K

Apéndice A

Colapso del sistema de muchas partículas con interacción δ atractiva en 2D y 3D

Consideremos un sistema de N fermiones interactuando via un potencial δ atractivo de 2 partículas (3.2). Un estudio similar es hallado en [56] donde se resuelve exactamente un sistema 1D de N bosones. La energía de estado base $E_0 = -\frac{1}{48}v_0^2 N(N^2 - 1)$ se obtiene usando la aproximación Hartree (exacta) como $E_0^{(H)} = E_B [(N - 1)/N]$. Todo el sistema ocupa el estado base E_B y se colapsa a $-\infty$ en un volúmen lineal en el límite de N muy grande. Este colapso unidimensional se prevendría si las partículas del sistema fueran fermiones pues todas no podrían ocupar el estado base.

El Hamiltoniano del sistema de N partículas es

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - v_0 \sum_{i < j}^N \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (\text{A.1})$$

El teorema de Raleigh-Ritz [42] implica que el valor de expectación $\mathcal{E} = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle$ es rigurosamente una cota superior del valor exacto de la energía del estado base E_0 , es decir

$$\mathcal{E} \geq E_0. \quad (\text{A.2})$$

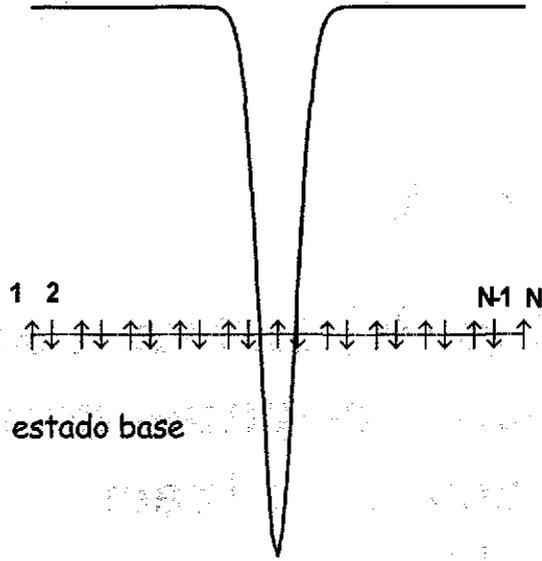


Figura A.1: Sistema unidimensional de N bosones con una función δ -atractiva como interacción. En el límite de $N \rightarrow \infty$ el sistema se colapsa en un volumen lineal, aun con una energía de amarre por partícula finita debido a la divergencia de la densidad.

El valor de expectación \mathcal{E} para ondas s se obtiene usando [57] la aproximación Hartree-Fock en el Hamiltoniano (A.1) con funciones de prueba $|\Phi_0\rangle$

$$|\Phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det [\langle r_j | \varphi_i \rangle],$$

que toman la forma de un determinante de Slater de una partícula (productos de funciones de onda espaciales y de espín) con las funciones $|\varphi_i\rangle =$

$|k_i\rangle|\sigma_i\rangle$, donde $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = L^{-d} \int d^d \mathbf{r} e^{ik_i \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle\sigma_i|\sigma_j\rangle = \delta_{ij}$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E} &\equiv \langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0|T|\Phi_0\rangle + \langle\Phi_0|V|\Phi_0\rangle \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \langle\mathbf{k}_1\sigma_1|\nabla_1^2|\mathbf{k}_1\sigma_1\rangle \\
 &\quad -\frac{v_0}{2} \sum_{\mathbf{k}_1\sigma_1, \mathbf{k}_2\sigma_2} \langle\mathbf{k}_1\sigma_1\mathbf{k}_2\sigma_2|\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|\mathbf{k}_1\sigma_1\mathbf{k}_2\sigma_2 - \mathbf{k}_2\sigma_2\mathbf{k}_1\sigma_1\rangle \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \langle\mathbf{k}_1\sigma_1|\nabla_1^2|\mathbf{k}_1\sigma_1\rangle \\
 &\quad -\frac{v_0}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 \text{ (occ)}} [\nu^2 \langle\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2|\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\rangle - \nu \langle\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2|\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|\mathbf{k}_2\mathbf{k}_1\rangle],
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

donde en el último paso el signo bajo la sumatoria indica estados ocupados e introducimos el número de estados intrínsecos de espín $\nu = \sum_{\sigma_1} 1 = \sum_{\sigma_1} \langle\sigma_1|\sigma_1\rangle$ y las sumas sobre los estados de espín $\sum_{\sigma_1\sigma_2} \langle\sigma_1\sigma_2|\sigma_1\sigma_2\rangle = \sum_{\sigma_1\sigma_2} 1 = \nu^2$; $\sum_{\sigma_1\sigma_2} \langle\sigma_1\sigma_2|\sigma_2\sigma_1\rangle = \sum_{\sigma_1\sigma_2} \delta_{\sigma_1\sigma_2} = \sum_{\sigma_1} 1 = \nu$. En el término de energía cinética en el lado derecho de (A.3) tenemos, en d dimensiones, usando $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow (L/2\pi)^d \int d^d \mathbf{k}$.

$$\begin{aligned}
 \langle T \rangle &\equiv \langle\Phi_0|T|\Phi_0\rangle \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{k}_1\sigma_1} \langle\mathbf{k}_1\sigma_1|\nabla_1^2|\mathbf{k}_1\sigma_1\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{k}_1, \sigma_1} L^{-d} \int d^d \mathbf{r} e^{-ik_1 \cdot \mathbf{r}_1} \nabla_1^2 e^{ik_1 \cdot \mathbf{r}_1} \langle\sigma_1|\sigma_1\rangle \\
 &\quad \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{\hbar^2}{2m} \nu \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int d^d \mathbf{k} k_1^2
 \end{aligned}$$

donde $\nu = 2$ para partículas de espín 1/2, $-k_1^2 \equiv (1/L)^d \int d^d \mathbf{r}_1 (\mathbf{k}_1)^2$, y L determina el tamaño de la muestra. Usando esto en la expresión para \mathcal{E} tenemos

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E} &= \langle T \rangle - \frac{v_0}{2} \left[\left(\frac{L}{2\pi}\right)^{2d} \int_{k \leq k_F} d^d \mathbf{k}_1 \int_{k \leq k_F} d^d \mathbf{k}_2 \left(\frac{e^{-ik_1 \cdot \mathbf{r}_1}}{L^{d/2}}\right)^* \left(\frac{e^{-ik_2 \cdot \mathbf{r}_1}}{L^{d/2}}\right) \right] \\
 &= \langle T \rangle - \frac{v_0}{2} \left[(\nu^2 - \nu) \left(\frac{L}{(2\pi)^2}\right)^d \left(\int_{k \leq k_F} d^d \mathbf{k}\right)^2 \right]
 \end{aligned} \tag{A.4}$$

Para obtener la energía de amarre por partícula, dividimos los términos de (A.4) entre el número total de partículas, $N = \nu (L/2\pi)^d \int_{k \leq k_F} d^d \mathbf{k}$, para

tener

$$\varepsilon/N = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\int d^d \mathbf{k} k^2}{\int d^d \mathbf{k}} - \frac{v_0}{2} \left[\left(\frac{1}{2\pi} \right)^d (\nu - 1) \int d^d \mathbf{k} \right]$$

La cota superior ε (A.2) queda entonces

$$E_0/N \leq \varepsilon/N = \frac{\hbar^2}{2m} A_d n^{2/d} - \frac{1}{4} v_0 n, \quad (\text{A.5})$$

donde $\hbar^2 k_F^2/2m = A_d n^{2/d}$, con $A_d = 4\pi d/(d+2) [\Gamma(d/2+1)/\nu]^{2/d}$, y hemos usado la densidad de partículas $n = N/L^d = \nu (2\pi)^{-d} \int_{k \leq k_F} d^d \mathbf{k}$.

En (A.5) se tiene una expresión que aproxima la energía por partícula del sistema para su estado base. En el límite de N muy grande (A.5) muestra que el sistema se colapsaría ($E_0/N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} -\infty$) en 3D como se muestra en [11], pág. 31, una predicción que resulta errónea desde el punto de vista de estabilidad del sistema. Para el sistema en 2D la aproximación no nos lleva a la misma conclusión directamente. Sin embargo, podemos asegurar que el sistema de N fermiones con el potencial δ atractivo como interacción se colapsará igualmente en 2D, ya que, como hemos mostrado en la sección 3.4 el número de estados ligados $n \rightarrow \infty$ para un pozo δ tiene su estado más ligado en $-\infty$, y, debido al principio de exclusión de Pauli, los estados ligados del pozo δ deben agregarse unos sobre otros a medida que el número de partículas N aumenta, y puesto que $k_F \rightarrow \infty$ en este límite, el estado más ligado del pozo, i.e., uno infinitamente ligado, estaría ocupado. Esto hará que la energía de amarre por partícula $E_0/N \rightarrow -\infty$ también en 2D. Estas divergencias están por lo tanto asociadas a las singularidades espaciales de corto alcance, i.e., las funciones tipo delta de Dirac, con las cuales se ha modelado la interacción. El hecho interesante es que estas funciones pueden ser regularizadas de manera que los pozos resultantes se asemejan a pozos someros con un único estado ligado.

Por otra parte, como el pozo en 1D tiene un *único* estado ligado, el sistema de N fermiones evolucionará hasta formar un gas ideal de dímeros puntuales en el límite de acoplamiento fuerte, como en la Fig. 4.1. El colapso es prevenido por el principio de exclusión de Pauli. Este problema fue estudiado con anterioridad en [58] debido a que la energía de estado base con interacción δ se puede obtener analíticamente. Se puede hacer corresponder directamente en 1D una imagen de la superconductividad como un estado compuesto por un gran número de partículas cuasibosónicas independientes y con una energía de amarre definida dada aquí en (3.25).

Bibliografía

- [1] K. Onnes, *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden*, No: 119-122 (1911).
- [2] W. Meissner y R. Ochsenfeld, *Naturwiss* **21**, 787 (1933).
- [3] B. D. Josephson, *Phys. Letters (Neth.)* **1**, 251 (1962). VI,7.
- [4] H. London y F. London, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A149**, 71 (1935).
- [5] V. Ginzburg y L. Landau, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **20**, 1064 (1950).
- [6] L. N. Cooper, *Phys. Rev.* **104**, 1189 (1956).
- [7] J. Bardeen, L. N. Cooper, y J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108** 1175 (1957).
- [8] J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity* (Benajmin Reading, Boston, 1964).
- [9] D. L. Goodstein, *States of Matter*, (Dover Pub. NY) 1985, págs. 401-402.
- [10] N. N. Bogoliubov, *Nuovo Cimento* **7**, 794 (1958); J. G. Valatin, *Nuovo Cimento* **7**, 843 (1958).
- [11] A.L. Fetter y J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many Particle Systems* (McGraw-Hill, NY, 1971) pág. 8 y págs. 330- 333.
- [12] D. R. Tilley y J. Tilley, *Superfluidity and Superconductivity* (A. Hilger, Bristol, 1986).
- [13] A. S. Davydov, *Phys. Repts.* **190**, 191 (1990), pág. 208; M. de Llano, S. Fujita, M. A. Solís y A. A. Valladares, *Czech. J. Phys.* **46** Suppl. S2, 599 (1996).

- [14] R. A. Ogg, *Phys. Rev.* **69**, 243 (1946); V. Ginzburg, *Ups. Fiz. Nauk.* **48**, 25 (1953) y *Fortschr. Phys.* **1**, 101 (1953); M. R. Schafroth *et al.*, *Helv. Phys. Acta* **30**, 93 (1957); J. M. Blatt *Theory of Superconductivity* (Academic Press, NY, 1965) pág. 55; P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [15] M. H. Anderson, E. A. Cornell, J. R. Ensher y W. Petrich, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3352 (1995); M. H. Anderson, E. A. Cornell, M. R. Matthews y C. E. Wiemann, *Science* **269**, 198 (1995).
- [16] D. Kleppner, T. Greytak, D. Fried, T. C. Killan, L. Willmann, D. Landhuis y S. C. Moss, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3807 (1998).
- [17] A. Robert, O. Sirjean, A. Browaeys, J. Poupard, S. Nowak, D. Boiron, C. I. Westbrook y A. Aspect, *Science* **292**, 5516 pág. 461 (2001); F. Pereira Dos Santos, J. Léonard, J. Wang, C. J. Barrelet, F. Perales, E. Rasel, C. S. Unnikrishan, M. Leduc y C. Cohen-Tannoudji, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3459 (2001).
- [18] W. Hansel, P. Hommelhoff, T. Hansch y J. Reichel, *Nature*, **413**, 498 (2001).
- [19] C. N. Yang, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 694 (1960).
- [20] F. London, *Superfluids*, Vol. I (Wiley, NY, 1950); M. R. Schafroth, *Phys. Rev.* **111**, 72 (1958).
- [21] M. Casas, J. M. Getino, M. de Llano, A. Puente, R. M. Quick, H. Rubio y D. M. van der Walt, *Phys. Rev. B* **50**, 15 945 (1994); R. M. Carter, M. Casas, J. M. Getino, M. de Llano, A. Puente, H. Rubio y D. M. van der Walt, *Phys. Rev. B* **52**, 16 148 (1995); L. van Hove, *Physica* **25**, 849 (1959).
- [22] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, (Pergamon, Oxford, 1995), págs. 160-162.
- [23] S. Fujita y S. Godoy *Quantum Statistical Theory of Superconductivity* (Plenum Press, NY, 1996); S. Fujita, T. Kimura y Y. Zeng, *Found. Phys.* **21**, 1117 (1991); S. Fujita y D. L. Morabito, *Cond. Matt. Theories* (Nova, NY) **14**, 105 (2000).
- [24] J. G. Bednorz y K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [25] 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, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 908 (1987).

- [26] N. F. Mott, *Contemp. Phys.*, **30**, 373 (1996).
- [27] P. W. Anderson, *The Theory of Superconductivity in High-Tc Cuprates* (Princeton Univ. Press, NJ, 1997).
- [28] H. Tanaka, *Railway Gazette Int.* 537 (1990).
- [29] Y. J. Uemura, L. P. Le, G. M. Luke, B. J. Sternlieb, W. D. Wu, J. H. Brewer, T. M. Riseman, C. L. Seaman, M. B. Maple, M. Ishikawa, D. G. Hinks, J. D. Jorgensen, G. Saito y H. Yamochi *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2665 (1991); *Nature* **352**, 605 (1991); *Physica B* **186-188**, 223 (1993); **282**, 194 (1997).
- [30] K. Bechgaard y D. Jérôme, *Phys. Scripta T* **39**, 37 (1991).
- [31] A. F. Hebard, *Rev. Matter. Sci.* **23**, 159 (1993).
- [32] J. H. Schön, C. Kloc y B. Batlogg, *Science Express*, 31 August 2001
- [33] C. E. Gough, M. S. Colclough, E. M. Forgan, R. G. Jorda, M. Keene, C. M. Muirhead, A. I. M. Rae, N. Thomas, J. S. Abell y S. Sutton, *Nature* **326**, 855 (1987).
- [34] D. A. Wollman, D. J. Van Harlingen, J. Giapintzakis y D. M. Ginsberg, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 797 (1995).
- [35] P. W. Anderson, *Phys. World* -December, 37 (1990).
- [36] N. F. Mott, *Contemp. Phys.* **30**, 373 (1990).
- [37] V. L. Ginzburg, *Contemporary Phys.* **33**, 1 (1992), págs. 15-23.
- [38] K. Miyake, *Prog. Teor. Phys.* **69**, 1794 (1983).
- [39] M. Randeria, J. M. Duan y L. Y. Sieh, *Phys. Rev. B* **41**, 327 (1990).
- [40] K. Yang y M. de Llano, *Am. J. Phys.* **57**, 85 (1989).
- [41] S. Gasiorowicz, *Quantum Physics* (J. Wiley & Sons, 1996) págs. 93-97.
- [42] E. Merzbahe, *Quantum Mechanics* (J. Wiley & Sons, NY, 1998), págs. 257-263 y pág. 275; D. A. Park, *Introduction to the Quantum Theory*, (Mc Graw-Hill, 1974), págs. 234-237.
- [43] L. Landau y E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon Press, NY, 1987) págs. 162-163.
- [44] G. B. Arfken y Hans J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, (Academic Press, NY, 2001).

- [45] M. Abramowitz, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, NY, 1964).
- [46] P. Gosdzinsky y R. Tarrach, *Am. J. Phys.* **59**, 70 (1991).
- [47] J. Labbé, S. Barišić y J. Friedel, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1039 (1967); D. M. Eagles, *Phys. Rev.* **186**, 456 (1969); A. J. Leggett, *J. Phys. (Paris) Colloq.* **41**, C7-19 (1980).
- [48] P. Nozières, S. Schmitt-Rink, *J. Low Temp. Phys.* **59**, 195 (1985).
- [49] R. Haussmann, *Z. Phys B* **91**, 291 (1993) y en *Phys. Rev B* **49**, 12975 (1994).
- [50] S. Adhikari, M. Casas, M. Fortes, M. de Llano, O. Rojo, A. Puente, A. Rigo, M. A. Solís y A. A. Valladares, *Phys. Rev. B* **62**, 8671 (2000).
- [51] M. Casas, N. J. Davidson, M. de Llano, T. A. Mamedov, A. Puente, R. M. Quick, A. Rigo y M. A. Solís, *Physica A* **295**, 425 (2001).
- [52] R. M. Ziff, G. E. Uhlenbeck y M. Kac, *Phys. Reps.* **32**, 169 (1977).
- [53] J. M. Blatt *Theory of Superconductivity* (Academic Press, NY, 1965) pág. 208.
- [54] M. Casas, A. Rigo, M. de Llano, O. Rojo y M. A. Solís, *Phys Lett. A* **245**, 55 (1998).
- [55] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani y J. Akimitsu, *Nature* **410**, 63 (2001).
- [56] F. Calogero y A. Degasperis, *Phys. Rev. B.* **41**, 327 (1990).
- [57] M. de Llano, *Mecánica Cuántica* (Facultad de Ciencias UNAM, México, 1996) págs. 208-209.
- [58] R. M. Quick, C. Esebbag y M. de Llano, *Phys. Rev. B* **47**, 11512 (1993).

Índice de Figuras

2.1	Se ilustra la diferencia entre la energía de amarre del par de Cooper (con momento del centro de masa $K = 0$) Δ_0 , y el gap Δ de excitación mínima BCS. $\Delta_0 = 2\hbar\omega_D e^{-2/\lambda} \ll \Delta \approx 2\hbar\omega_D e^{-1/\lambda}$	11
2.2	Secuencia de la distribución de velocidades de un condensado de Bose-Einstein en un gas de átomos de Na. A medida que $T \rightarrow T_c$ la mayoría de las partículas tienen la misma rapidez, cercana a cero, y comparten una misma función de onda. La dispersión observada para $T < T_c$ es debida al principio de incertidumbre de Heisenberg (Tomada de http://www.cua.mit.edu del MIT)	14
3.1	El primer (curva llena) y segundo (curva discontinua) miembros de (3.15) para el pozo en 2D con $V_0/ E = 300$; las intersecciones de las curvas, marcadas con círculos, indican estados ligados. Siempre habrá un estado ligado entre dos ceros consecutivos de la función $J_0(x)$	23
3.2	Condición (3.15) pero para $V_0/ E = 2700$. El número de estados ligados aumenta a medida que el potencial (3.4) se aproxima a una función delta de Dirac	24
3.3	Ilustración de la condición (3.17) donde cada raíz representa un estado ligado. Con el comportamiento oscilatorio mostrado se puede apreciar que las raíces de (3.17) formarán un conjunto infinito y ordenado crecientemente, de modo que el estado más ligado será infinitamente ligado	25

3.4	El sistema de N fermiones con un potencial de interacción δ - lleva al colapso del sistema tanto en 2D como en 3D con una densidad de partículas $n \rightarrow \infty$ y una energía de amarre por partícula E_0/N que diverge a $-\infty$, de acuerdo con el valor variacional en (A 5) que es una cota superior.	26
3.5	Se muestra esquemáticamente el significado físico de los parámetros de los potenciales de regularización a_0 (curva llena) y a (discontinua) desde el punto de vista del problema reducido, Ec (3 6), de una partícula de masa $m^* = m/2$ en un pozo cuántico δ	30
4.1	Imagen de un gas de dímeros formados cada uno a partir del único estado ligado de un pozo δ -regularizado. Con este potencial se evita el colapso del sistema de N fermiones pues a lo más habrá dos partículas ligadas en un pozo.	35
4.2	Fracción de electrones apareados en bosones como función del acoplamiento λ , según el modelo estadístico binario de equilibrio químico y térmico de la Ref [47]. La curva delgada reproduce la expresión BCS $[\sinh(1/\lambda)]^2$ para $T = 0$. Las líneas gruesas ilustran la fracción (4 19) dentro del modelo estadístico de primeros principios para tres distintos valores de T/T_F	38
A.1	Sistema unidimensional de N bosones con una función δ -atractiva como interacción. En el límite de $N \rightarrow \infty$ el sistema se colapsa en un volumen lineal, aun con una energía de amarre por partícula finita debido a la divergencia de la densidad	51

Índice de tablas

3.1	Primeras raíces de la condición (3.17) de las cuales se obtienen los primeros estados ligados del pozo δ en 2D.	25
3.2	Resumen de potenciales δ -regularizados en d dimensiones.	29
5.1	Resumen de resultados para la relación de dispersión ϵ_K en los límites de muy baja densidad ($k_F \rightarrow 0$) y acoplamiento débil ($\lambda \rightarrow 0$).	45

