



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MEXICO**  
**POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES**  
**INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES**

“SUPERCONDUCTORES CON INTERACCIONES MODELO”

TESIS  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

PRESENTA:  
JULIO ORTEGA SEGURA

TUTOR  
DR. MANUEL DE LLANO DE LA GARZA  
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES

COMITÉ TUTOR  
DRA. MARCELA DOLORES GREYER GONZÁLEZ  
FACULTAD DE CIENCIAS  
DR. ALIPIO CALLES MARTÍNEZ  
FACULTAD DE CIENCIAS

MÉXICO, D.F. DICIEMBRE 2014



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.

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE  
MEXICO**

**INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN  
MATERIALES (IIM)**

**TESIS DE MAESTRÍA**

**“SUPERCONDUCTORES CON  
INTERACCIONES MODELO”**

**Tutor principal: Dr. Manuel de Llano de la Garza**  
**Tutores: Dra. Marcela Dolores Grether González**  
**Dr. Alipio Calles Martínez**

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a DIOS por la vida misma, por darme la oportunidad de terminar este trabajo de tesis que es una forma de darle gracias por todas las bendiciones y amor recibido por parte de Él en toda mi existencia, y que por añadidura me permite buscarlo y conocerlo mediante su palabra. ¡Gracias!

A mis padres, Julio y María del Rosario, quienes han sido un ejemplo de vida, de dedicación y trabajo en las pequeñas metas que se proponen día a día sin dar marcha atrás. Pero sobre todas las cosas, por su admirable paciencia.

A mis hermanos David, Verónica, Cecilia y María del Rosario; quienes de una u otra manera me han impulsado con sus valores y consejos. Así como de mis sobrinos Aarón, Fátima, Berenice, Diana y Leonardo; de quienes sigo aprendiendo de cómo se puede conocer y amar jugando.

A mis grandes amigos María Guadalupe M. D., Ángel G. P., Jaime Méndez Carrillo, Héctor Rosas G., Nancy Olguín y Hércules Asís O. S. (†).

A mi Tutor Principal Dr. Manuel de Llano de la Garza por el gran apoyo recibido por medio de su conocimiento para desarrollar el tema de esta tesis así como el dado al proporcionarme la beca PAPIIT. Pero por encima de todo, por su exigencia y paciencia para desarrollar el tema; además de darme la oportunidad de conocer a una persona en quien puede observarse que el ser un investigador es dedicación, pero ser un excelente investigador es una vocación.

A la Dra. Marcela Grether González y al Dr. Alipio Calles Martínez (miembros del Comité Tutor) por la revisión y múltiples aportaciones en la realización de este trabajo de tesis.

A los miembros del jurado:

Dr. Miguel Ángel Solís Átala, Investigador Titular “B” de Tiempo Completo, Instituto de Física (UNAM).

Dr. Doroteo Mendoza López, Investigador Titular “B” de Tiempo Completo, Instituto de Investigaciones en Materiales (UNAM).

Dr. Francisco Morales Leal, Investigador Titular “A” de Tiempo Completo, Instituto de Investigaciones en Materiales (UNAM).

Dr. Gerardo Carmona Ruiz, Profesor Asociado de Carrera “C” de Tiempo Completo, Facultad de Ciencias (UNAM).

Que gracias a sus valiosas observaciones y aportaciones no hubiera sido posible terminar adecuadamente este trabajo de tesis.

Y a Francisco Zúñiga, que gracias a la lectura e interés de la sección 3.1 ésta se pudo concluir en forma satisfactoria.

**Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM**, clave del proyecto IN100314, nombre del proyecto “Superconductores de Alta Temperatura”. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida.

# INDICE

	<b>Pág.</b>
<b>INTRODUCCIÓN</b>	4
<b>CAPÍTULO 1 Introducción. Conceptos y Elementos de la Teoría de la Superconductividad</b>	
1.1 Fermiones y Bosones	8
1.2 Formalismo BCS	10
1.3 Diferencia entre Pares de Cooper (CP's) y Pares BCS	12
1.4 Pares de Cooper BCS y su Condensación Bose-Einstein	13
1.5 Gas Ideal Cuántico de Bosones Permanentes	16
1.6 Gas de Bosones de Pares de Cooper con su Relación Lineal de Dispersión	18
1.7 Gas de Bosones de Pares de Cooper <i>Rompibles e Irrompibles</i>	19
1.8 Modelo Binario Simple Ideal Bosón-Fermión	20
<b>CAPÍTULO 2 Brecha de Energía BCS</b>	
2.1 Deducción Heurística de la Brecha (“ <i>gap</i> ”) de un Superconductor BCS a $T = 0$	24
2.2 Solución Analítica de la Ecuación de la Brecha de BCS en $d = 1, 2$ y $3$	

Dimensiones a $T = 0$	27
2.3 Ecuación de la Brecha BCS para $T \leq T_c$ ( $T \simeq T_c$ )	30
2.4 Formalismo Generalizado BEC (GBEC)	31
2.5 Energía de Condensación de un Superconductor a $T = 0$	33

### **CAPÍTULO 3 Energía Libre de Helmholtz del Estado Superconductor vs Normal Dentro del Formalismo GBEC**

3.1 Comparación de la Energía Libre de Helmholtz del Estado Superconductor con la Correspondiente al Estado Normal.	35
---	----

<b>CONCLUSIONES</b>	39
---------------------	----

### **APÉNDICE A Pozos de Potencial Delta en $d = 1, 2$ y $3$ Dimensiones**

A.1 Pozo de Potencial Delta 1D	41
A.2 Pozo de Potencial Delta en $d$ -dimensiones	42
A.3 Pozo de Potencial Delta 2D	42
A.4 Pozo de Potencial Delta 3D	44

## **APÉNDICE B Pozos de Potencial Delta Regularizados en $d = 2, 3$**

B.1 Pozo de Potencial Delta 2D Regularizado 45

B.2 Pozo de Potencial Delta 3D Regularizado 46

APÉNDICE C **Cálculo de la integral**  $\int_0^{\hbar\omega_D/2k_B T_c} d\xi (\tanh \xi / \xi)$  47

APÉNDICE D **Ecuación de la Brecha BCS  $\Delta(T)$  para  $T \leq T_c$  ( $T \simeq T_c$ )** 49

## **APÉNDICE E Sistema Superfluido BCS 2D a $T = 0$ K**

E.1 La Superfluidez en los  $^3\text{He}$  y  $^4\text{He}$  Líquidos 52

E.2 Monocapa Diluída de  $^3\text{He}$  Sobre una Película Delgada de  $^4\text{He}$  II 52

APÉNDICE F **Lista de Símbolos** 54

REFERENCIAS 55

# INTRODUCCIÓN

El interesante fenómeno de la superconductividad fue descubierto por H. Kamerlingh Onnes, tres años después de la licuefacción del helio. La disponibilidad de este líquido le permitió investigar la resistencia eléctrica de los metales a bajas temperaturas. Eligió el mercurio para su estudio, ya que este material puede ser purificado por destilación y además, en aquellos tiempos existía la especulación de que la resistencia eléctrica de los metales muy puros podía tender a cero a  $T = 0$ . Cuando el Hg se enfría (a temperaturas de alrededor de los 4.2 K) aparece una transición abrupta a un estado aparentemente de resistencia cero. Onnes describió el nuevo estado como superconductor y pudo establecer que no había conexión con la alta pureza del material, ya que agregándole al mercurio cantidades importantes de impurezas observó un efecto pequeño en la transición al estado superconductor, a pesar de que en el estado normal la resistencia se incrementa considerablemente.

Desde entonces, el fenómeno de la superconductividad ha llamado la atención de un gran número de investigadores, quienes han tratado de explicarlo en base a diversos modelos teóricos con el propósito de poder predecir la existencia de materiales superconductores con una temperatura crítica  $T_c$  del orden de la temperatura ambiente. En la actualidad los superconductores conocidos suelen clasificarse en: a) los orgánicos metálicos (con  $T_c$ 's que rondan el 1 K), materiales que están constituidos por cadenas paralelas de átomos, considerándose materiales casi 1D, b) los orgánicos llamados *ET* (cuyas  $T_c$ 's llegan a los 13 K) así como los cupratos (con las  $T_c$ 's más altas hasta la fecha) que están constituidos por planos de átomos, donde estos dos tipos de materiales son considerados casi 2D; y finalmente c) los superconductores 3D que incluyen tanto los materiales superconductores convencionales (e.g., los elementales, aleaciones binarias simples, etc.) así como los exóticos (bismutatos, fermiones pesados, fullerenos, cupratos, etc.).

Uno de los principales fundamentos de cualquier teoría o formalismo utilizado para el estudio de un material superconductor es la justificación de que este sistema asuma preferentemente el estado superconductor a cualquier temperatura  $T$  por debajo de la temperatura crítica  $T_c$ , considerando que el sistema tiende a adquirir el estado de menor energía y que a estas temperaturas el sistema superconductor suele presentar tanto la fase en el estado normal como la fase en el estado superconductor. Cuando hablamos de la entropía asociada al sistema, en todos los superconductores la entropía decrece notablemente cuando el sistema se encuentra a una temperatura por debajo de la temperatura crítica  $T_c$ , donde este decrecimiento de la entropía entre el estado normal y superconductor nos dice que el estado superconductor es más ordenado que el estado normal dado que la entropía es una medida de desorden en el sistema. Empíricamente, la gráfica de la entropía para el estado normal  $S_n$  se localiza por encima de la gráfica de la entropía del estado superconductor  $S_s$  en el intervalo de temperaturas  $[0, T_c]$ . En este mismo intervalo de temperatura, la gráfica de la energía libre de Helmholtz para la fase en el estado superconductor  $F_s$  queda por debajo de la gráfica de la energía libre  $F_n$  para la fase en el estado normal. Ya que la energía libre de Helmholtz se define en términos del gran potencial termodinámico  $\Omega$  como  $F \equiv E - TS = \Omega + \mu N$ , aquí se considera el gran potencial termodinámico  $\Omega(T, L^d, \mu, N_0, M_0)$  que se obtiene a partir del Hamiltoniano total  $H^{GBEC}$  que define al formalismo GBEC (Condensación Bose-Einstein Generalizada). Donde  $T$  es la temperatura,  $\mu$  el potencial químico,  $L^d$  es el volumen  $d$ -dimensional del sistema, mientras  $N_0$  y  $M_0$  son los números de bosones formados por un par de electrones o de un par de hoyos (respectivamente) con momentum del centro de masas (CMM) igual a cero. Esta energía libre de Helmholtz, obtenida dentro del formalismo GBEC, es utilizada en la obtención de las energías libres tanto de la fase en el estado normal como la



correspondiente a la fase en el estado superconductor para finalmente comparar estas energías libres entre sí. Se hace notar que el formalismo GBEC se caracteriza principalmente por considerar en su análisis la condensación Bose-Einstein (BEC) de CP's-2e (bosones formados por el acoplamiento de dos electrones con  $CMM \neq 0$ ) y CP's-2h (bosones formados por el acoplamiento de un par de hoyos con  $CMM \neq 0$ ) así como la formación y desintegración de éstos de y hacia electrones y hoyos desapareados en el mar de Fermi. Una de las ventajas que nos ofrece el formalismo GBEC es que contempla como casos particulares las diversas teorías familiares para superconductores y superfluidos, incluyendo el esquema *crossover* (o “cruce”) en sus cuatro versiones, cada una con su respectivo vértice de interacción bosón-fermión (BF).

De acuerdo con lo anterior, esta tesis tiene como objetivos:

- 1) comparar la energía libre de Helmholtz asociada al estado superconductor  $F_s$  con la energía libre correspondiente a la fase en el estado normal  $F_n$  en el intervalo de temperaturas  $[0, T_c]$  dentro del formalismo GBEC aplicado a sistemas superconductores.
- 2) Discutir la relación intrínseca que existe entre las propiedades que caracterizan a los materiales superconductores (su brecha, temperatura crítica y energía de condensación) y el modelo bosón-fermión que se ha considerado para su estudio.

A lo largo de la descripción de los potenciales de interacción que aquí se han considerado para mimetizar el apareamiento entre fermiones, el modelo BF (bosón-fermión) y el pozo de potencial delta regularizado, se esclarecen diversos conceptos y resultados encontrados durante el estudio de las propiedades de un material superconductor, entre estos:

- i) se da la deducción heurística de la brecha (*gap*) BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) de un material superconductor a  $T = 0$  mediante la minimización de la energía asociada al estado superconductor dada en términos de la probabilidad de ocupación de los estados del par,  $k$ .
- ii) La diferencia entre un Par-BCS y un Par de Cooper (CP).
- iii) La obtención del valor de la energía para el estado ligado de un pozo de potencial delta regularizado (en 2D y 3D), así como la demostración de su unicidad. El uso de este tipo de pozos para mimetizar el apareamiento entre fermiones no se especifica en algunas referencias.

En el CAPÍTULO 1 se proporcionan los conceptos que involucran la definición de fermión y bosón, así como la ocupación de los niveles de energía de un sistema compuesto por muchas partículas idénticas (bosones o fermiones). Posteriormente, se muestra el esquema de la dinámica electrón-fonón que define al formalismo BCS, para después exhibir la diferencia entre un CP-BCS de un par de Cooper (CP), este último utilizado en todo el desarrollo posterior del presente trabajo. En las secciones subsecuentes se tiene como objetivo final la descripción del modelo simple bosón-fermión, el cual representa a un gas binario de bosones (e.g., pares de electrones llamados pares de Cooper) y fermiones desapareados (e.g., electrones como portadores de carga). Que al adicionar en su estudio de este tipo de sistemas una relación lineal de dispersión de los CP's que incluya el efecto del rompimiento de pares, implica la posibilidad de una condensación Bose-Einstein (BEC) para sistemas con dimensiones mayores a la unidad. Así como la obtención de temperaturas substancialmente mayores que las obtenidas por la teoría BCS de superconductividad, utilizando el mismo modelo de interacción BCS entre fermiones. Por simplicidad, iniciamos el estudio de un sistema gaseoso conformado de CP's y fermiones desapareados considerando los casos particulares: i) cuando los CP's son *irrompibles* y ii) CP's que se pueden *romper*.

En el CAPÍTULO 2 se introduce el concepto de brecha (“*gap*”) electrónica de un sistema superconductor mediante la minimización de la energía correspondiente al estado superconductor,  $E_S$ . Como una revisión, posteriormente se obtienen las expresiones analíticas de la brecha BCS a  $T = 0$  para sistemas de muchos electrones con el modelo de interacción BCS en una, dos y tres dimensiones, en el caso límite de acoplamiento débil pero con un ancho arbitrario de interacción  $\nu = \hbar\omega_D/E_F$ ,  $0 < \nu < \infty$ . Donde  $\hbar\omega_D$  es el máximo de energía de un fonón que actúa como una fuerza atractiva mediadora entre un par de electrones, y  $E_F$  es la energía de Fermi. Los resultados presentados consideran tanto el mecanismo de apareamiento fonónico ( $\hbar\omega_D/E_F \ll 1$ ) así como el no fonónico ( $\hbar\omega_D/E_F > 1$ ), donde las energías del bosón mediador no son pequeñas comparadas con  $E_F$ . A continuación, mediante un método alternativo, se obtiene la ecuación de la brecha BCS para el caso  $T \leq T_c$  ( $T \simeq T_c$ ) y cuyo valor es de cero para  $T_c \leq T$ . Después se da una revisión tanto de los principios y conceptos básicos del formalismo GBEC así como de los principales resultados que se obtienen a partir de éste. Con este objetivo, a partir del Hamiltoniano total  $H^{GBEC}$  y el potencial  $\Omega(T, L^d, \mu, N_0, M_0)$  gran canónico que definen al modelo GBEC se citan las tres ecuaciones autoconsistentes que se obtienen dentro de este formalismo tanto para asegurar la conservación de la carga como la estabilidad termodinámica del sistema, dos de tipo brecha y una *ecuación de número*. Estas ecuaciones al ser resueltas nos proporcionan las tres variables termodinámicas:  $n_0(T, n, \mu)$ , densidad del número de CP’s-2e con CMM = 0;  $m_0(T, n, \mu)$ , densidad del número de CP’s-2h con CMM = 0; y el potencial químico  $\mu(T, n)$ . Por otra parte, las tres ecuaciones autoconsistentes al ser particularizadas son capaces de reproducir las teorías estadísticas conocidas para los materiales superconductores, incluyendo el esquema *crossover* BCS-Bose en sus cuatro versiones llamadas A, B, C y D. Por último, se da la definición y ecuaciones de las energías de condensación a la temperatura  $T = 0$  para las versiones *crossover* B, C y D. Estas dos últimas frecuentemente aplicadas en las teorías de SC’s (superconductores convencionales) y SF’s (superfluidos), en las cuales una práctica común consiste en ignorar los CP’s-2e o los CP’s-2h.

En el CAPÍTULO 3 se demuestra, dentro del formalismo GBEC, que la energía libre de Helmholtz asociada al estado superconductor es menor o igual que la energía libre correspondiente al estado normal dentro del intervalo de temperaturas  $0 \leq T \leq T_c$ .

En las CONCLUSIONES se resumen los resultados y su análisis para finalmente establecer las implicaciones a las cuales conllevan.

En el Apéndice A se tiene como objetivo la discusión del modelo adecuado de interacción entre partículas para la formación de pares de Cooper (pares de electrones u hoyos) en sistemas de muchos cuerpos en la materia condensada. Como probables modelos de interacción atractiva entre fermiones se estudian los pozos de potencial Delta en 1D, 2D y 3D. Justificándose el uso de este tipo de pozos sólo para el caso 1D debido a que el pozo de potencial Delta 1D soporta un único estado ligado. En tanto para los pozos de potencial Delta 2D y 3D, se demuestra la existencia de un número infinito de estados ligados.

En el Apéndice B se muestra cómo la regularización de los pozos de potencial delta atractivos 2D y 3D es de carácter fundamental, debido a que (como se demuestra en esta sección) poseen *uno y sólo un* estado ligado de energía. Por esta razón los pozos de potencial delta regularizados son útiles para modelar y justificar la presencia de pares de Cooper en diversos materiales superconductores. El proceso de regularización, en  $d = 2$  o  $3$ , consiste en construir un pozo delta  $\delta$  con una intensidad infinitesimalmente pequeña  $\nu_0$  a partir de un pozo original con ancho y profundidad finita.

En los Apéndices C y D se deducen las ecuaciones para la temperatura crítica  $T_c$  de transición al estado superconductor y la forma de  $\Delta(T)$  para temperaturas  $T \leq T_c$  ( $T \simeq T_c$ ), respectivamente.

En el Apéndice E se obtienen las ecuaciones de Miyake para un sistema que consiste en una monocapa diluída de  $^3\text{He}$  sobre una película delgada de  $^4\text{He}$  II, en el que se enfatiza el uso de un pozo de potencial delta 2D regularizado para el estudio de la superfluidez de dicho sistema.

Y por último en el Apéndice F se da una lista de símbolos utilizados a lo largo de este trabajo.

# CAPÍTULO 1

## Introducción. Conceptos y Elementos de la Teoría de la Superconductividad

### 1.1 Fermiones y Bosones

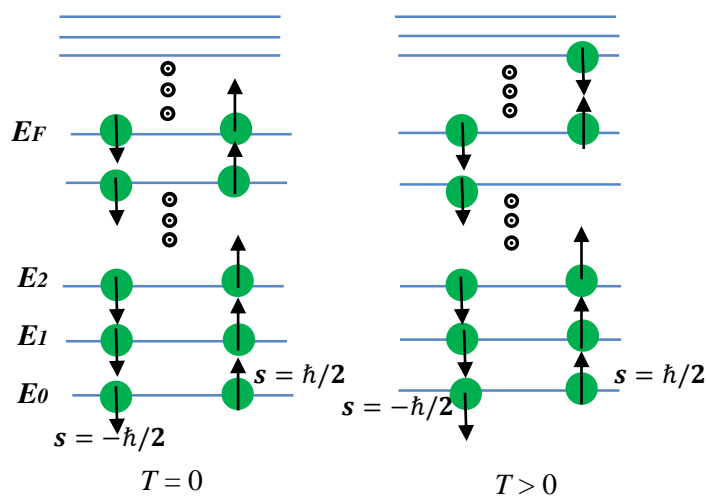
Uno de los conceptos centrales de la mecánica cuántica es el de la estadística que obedecen las partículas microscópicas. Estas partículas pueden ser átomos, electrones o núcleos; y que pueden caracterizarse a través de los parámetros como su masa, carga eléctrica y el espín intrínseco. Este último, una especie de momento magnético cuyo origen es una de las principales manifestaciones de los fenómenos cuánticos [1].

El espín está cuantizado y solamente puede tomar valores que nos permiten clasificar a las partículas en dos familias: aquellas cuyo espín es múltiplo entero impar de  $h/4\pi = \hbar/2$ , donde  $h$  es la constante de Planck, o bien partículas cuyo espín es múltiplo entero de  $h/2\pi \equiv \hbar$ , incluyendo el valor de cero. Las partículas de la primera familia se denominan fermiones, y los de la segunda, bosones. Los sistemas de fermiones idénticos obedecen el Principio de Exclusión de Pauli: “Dos fermiones idénticos no pueden ocupar el mismo estado cuántico”. En contraste con los sistemas fermiónicos, en un sistema de muchos bosones idénticos un gran número de éstos pueden ocupar un mismo estado. Tales propiedades asociadas a la intimidad del mundo microscópico tienen consecuencias muy importantes en las propiedades macroscópicas de los sistemas compuestos por un número grande de fermiones o bosones. Esto se explica a continuación.

Considérese primero un sistema que consiste de un número  $N$  grande (del orden de  $10^{23}$  o más) de fermiones en el interior de una caja, por el momento pensemos en electrones. La naturaleza cuántica de éstos implica que solamente pueden ocupar cualquiera de los niveles de energía que se muestran en la figura 1.1. Cuando la temperatura del sistema es cero, las  $N$  partículas deben ocupar los niveles más bajos en energía, hasta una energía máxima llamada la energía de Fermi  $E_F$ . La temperatura correspondiente a esta energía máxima se conoce como la temperatura de Fermi  $T_F \equiv E_F/k_B$ , donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann. La temperatura de Fermi depende exclusivamente de tres factores: a) de la densidad del número de fermiones, es decir número de fermiones por unidad de volumen del sistema considerado; b) de la masa de los mismos; c) del número intrínseco de estados del fermión, tales como su espín y su carga. Por ejemplo,  $T_F$  es del orden de 3 a 5 K para el helio-3 líquido y del orden de  $10^4$  a  $10^5$  K para un gas de electrones en un metal. Sin embargo debido al principio de exclusión de Pauli, sólo puede haber dos partículas en cada estado, ambas con espín opuesto. Para temperaturas  $T > 0$ , algunas partículas podrán ocupar estados más altos de energía, pero en ningún momento puede haber más de dos electrones idénticos en el mismo estado.

En el caso de los bosones, por ejemplo como los átomos de helio en el helio-4 líquido, estos no satisfacen el principio de Pauli y por ello, para  $T = 0$ , todas las  $N$  partículas ocupan el estado más bajo de energía como se muestra en el último esquema de la figura 1.1. Para temperaturas diferentes de cero, los  $N$  átomos de helio pueden ocupar otros niveles, por encima del de menor energía, sin restricciones excepto por el hecho de que la temperatura es una medida de la suma de las energías de cada bosón.

## Fermiones



## Bosones

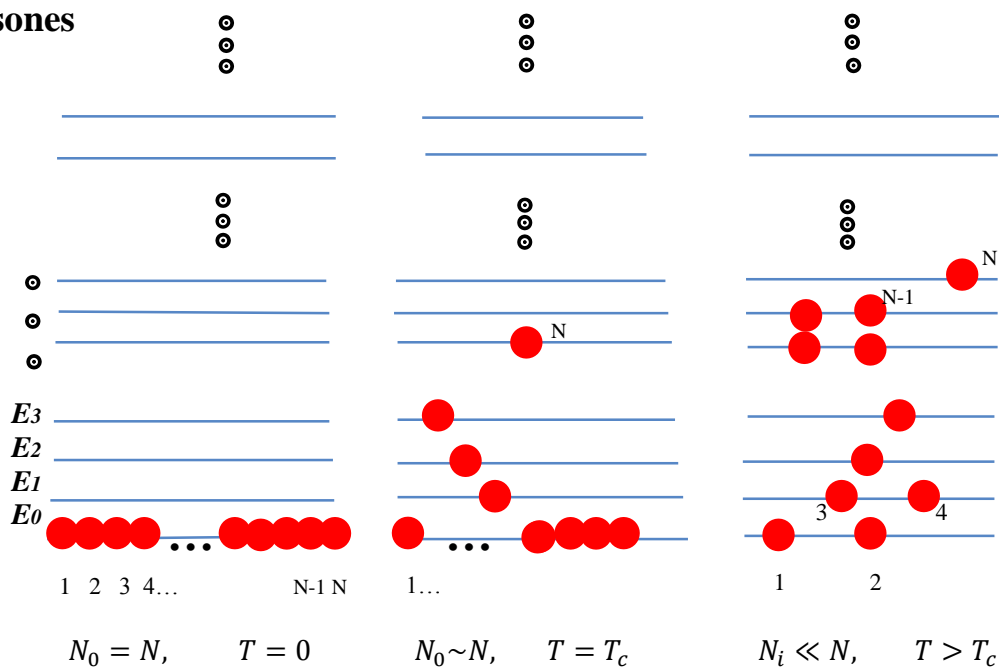


Figura 1.1 Ocupación de los niveles energéticos por partículas idénticas para un sistema de  $N$  partículas, en el primer esquema se muestra la ocupación de tales niveles para un sistema de  $N$  fermiones; mientras en el segundo se muestra la ocupación correspondiente para un sistema de  $N$  bosones. [Figura tomada de la referencia 1].

Cuando un gas de bosones a temperatura  $T$  se empieza a enfriar, los bosones tienden a ocupar los niveles más bajos de energía. Para temperaturas por debajo de una cierta temperatura crítica  $T_c$  definida, una fracción significativa del total  $N$  de bosones empieza a ocupar el nivel más bajo. A este fenómeno se le denomina condensación de Bose-Einstein (BEC) [1].

## 1.2 Formalismo BCS

En el contexto de la superconductividad, entendemos como bosones a los electrones u hoyos acoplados por pares (CP's) debido a su interacción con la red cristalina iónica del material, Fröhlich fue el primero en sugerir este mecanismo de interacción. Este acoplamiento puede ser visto como el intercambio de fonones entre los electrones de conducción, donde se considera a los fonones como cuantos de energía vibracional de la red. El esquema de este proceso se muestra en la figura 1.2, diagrama de Feynman. Lo anterior, tiene el sustento experimental conocido como Efecto Isótopo, observado por primera vez cuando se estudiaba el comportamiento superconductor del mercurio, encontrándose que la temperatura crítica  $T_c$  para la transición a la superconductividad depende de la masa  $M$  isotópica de los iones de la red en la forma  $T_c M^\alpha = cte$ , donde  $\alpha$  es el coeficiente isotópico con un valor experimental aproximado de 0.5 para la mayoría de los superconductores.

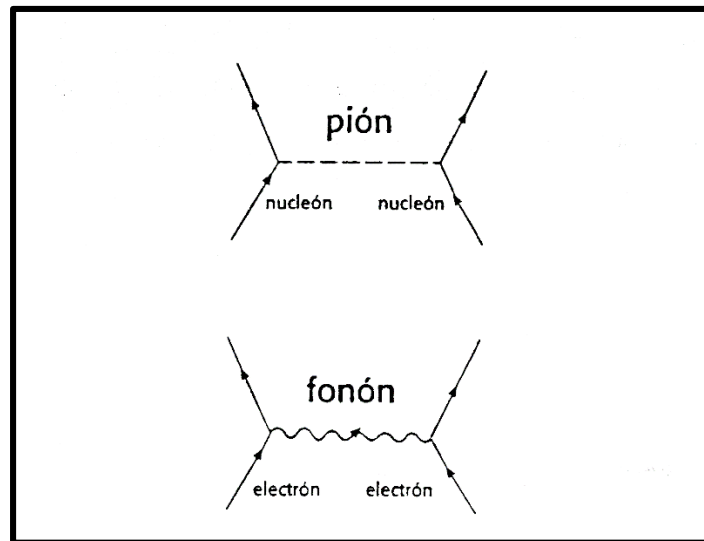


Figura 1.2 Diagramas llamados de Feynman que permiten visualizar las interacciones atractivas entre dos nucleones (a través del intercambio de un pión, interacción de Yukawa) y entre dos electrones en una red iónica en vibración (a través del intercambio virtual de un fonón, que constituye la interacción electrón-fonón de Fröhlich). [Figura tomada de la referencia 1].

Lo anterior nos indica algo tan notable de cómo el fenómeno eléctrico de la superconductividad es el resultado de una propiedad puramente mecánica de la red, es decir, las vibraciones de la red son parte del proceso de superconducción. De hecho, la teoría BCS considera el acoplamiento entre electrones por medio de la red cristalina para la formación de CP's con CMM = 0 (pares "ordinarios" BCS de Cooper) los cuales experimentarán una BEC por debajo de una temperatura crítica  $T_c$  y cuyo tratamiento cuántico se basa en considerar la interacción atractiva entre cada par de electrones por el

intercambio de un fonón, interacción que supera su repulsión eléctrica. La atracción neta efectiva o energía de enlace del par electrónico típicamente es del orden de  $1 \text{ meV}$ .

Un modelo visual de la atracción del par de Cooper consiste en el paso de un electrón que atrae a los iones que componen la red, causando una leve onda en la dirección de su recorrido. En tanto otro electrón que pasa en la dirección opuesta es atraído hacia tal deformación o desplazamiento de carga, la red se polariza eléctricamente como se muestra en la figura 1.3.

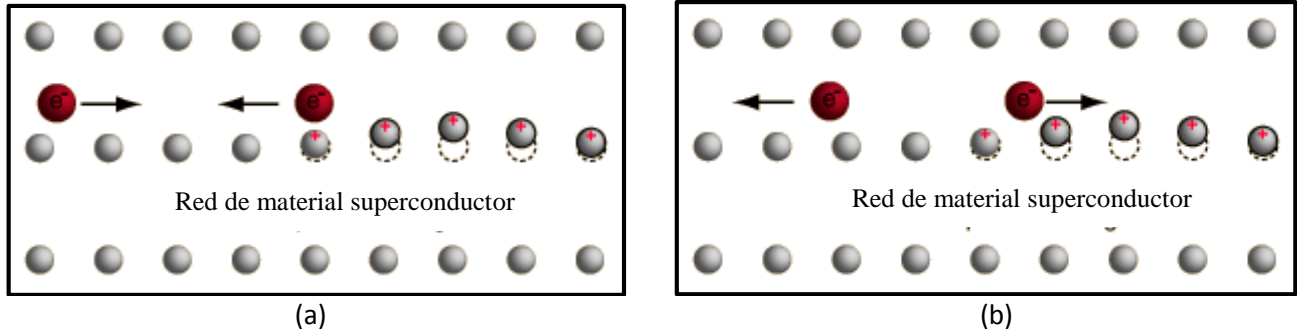


Figura 1.3 En (a) y (b), se muestra el paso de un electrón que atrae a la red, originando una ligera ondulación en dirección de su recorrido; otro electrón pasando en dirección opuesta es atraído hacia tal deformación. Lo que constituye el acoplamiento entre electrones para la formación de un CP.

La teoría microscópica de superconductividad BCS [2] es la base de la teoría cuántica de la superconductividad, dentro de la cual se considera una variación en el comportamiento de los electrones de conducción debido a que la red cristalina participa activamente en la formación del estado superconductor, lo que no conlleva a cambios en la estructura del material. Aun cuando la interacción atractiva entre los electrones es extremadamente débil, es lo suficientemente intensa para ser capaz de ordenar el sistema electrónico a pesar de las grandes energías de los electrones de conducción, que son del orden de varios electrón-volts (energía de Fermi,  $E_F$ ), ver figura 1.4-(a). En la teoría BCS la interacción atractiva entre un par de fermiones es modelada por medio de un modelo matemático sencillo de interacción, que considera a un fermión en el estado relativo  $\mathbf{k}$  (con respecto al vector de onda  $\mathbf{K}$  del centro de masas) y otro en el estado  $\mathbf{k}'$ , siendo  $\mathbf{p}$  el momento relativo lineal; de modo que  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$  se refieren al estado del par antes y después de la interacción durante la cual se absorbe y emite un fonón de energía máxima  $\hbar\omega_D$ , figura 1.4-(b). Si las energías cinéticas de los fermiones que interactúan atractivamente son  $\epsilon_{k_1} \equiv \hbar^2 k_1^2 / 2m^*$  y  $\epsilon_{k_2} \equiv \hbar^2 k_2^2 / 2m^*$ , el modelo de interacción BCS está dado como

$$V_{kk'} = \begin{cases} -V & \text{si } E_F - \hbar\omega_D < \epsilon_{k_1}, \epsilon_{k_2} < E_F + \hbar\omega_D \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (1.1)$$

Con  $V > 0$ ,  $E_F \equiv \hbar^2 k_F^2 / 2m^*$  la energía de Fermi,  $V_{kk'}$  la doble transformada de Fourier de la interacción en la cual  $k = (1/2)|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|$  y  $k' = (1/2)|\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}'_2|$  son las magnitudes de los vectores de onda relativos,  $m^*$  es la masa efectiva del fermión y  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$  es el momento del centro de masas (CMM) del par fermiónico acoplado.

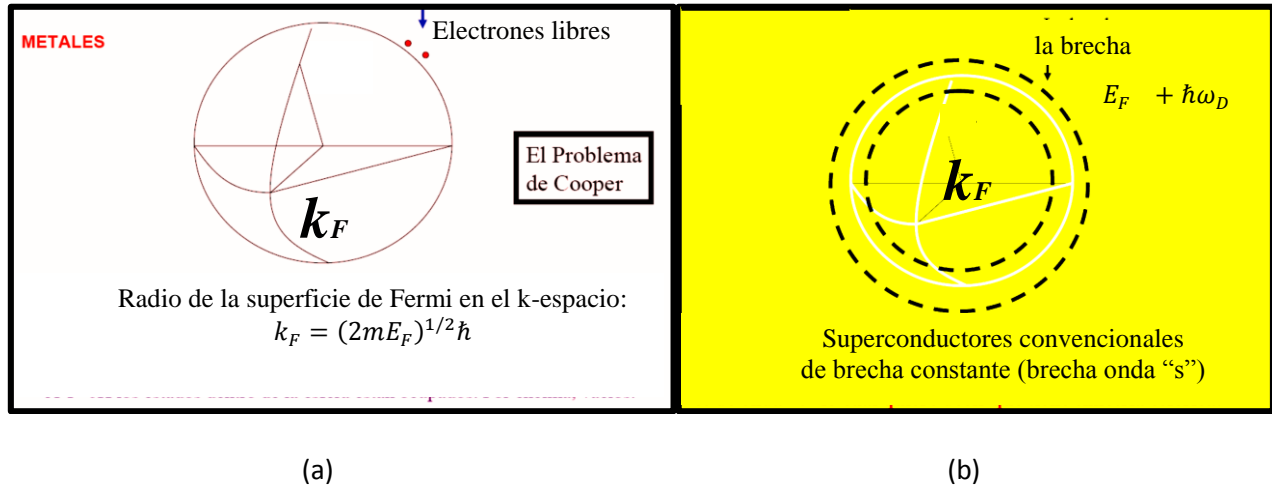


Figura 1.4 (a) Superficie de Fermi correspondiente al modelo de electrón libre en un metal en el espacio recíproco. A 0 K todos los estados dentro de la esfera están ocupados mientras los estados fuera de ella están vacíos. (b) Brecha BCS en el espacio recíproco 3D, cuando la brecha es constante se dice que la brecha es de onda “s”, lo que quiere decir que tiene simetría esférica.

Si bien aquí empleamos principalmente el modelo de interacción dado en la ecuación (1.1) existen otras simetrías de apareamiento que pueden ser representadas por la onda-S pura, en los Apéndices A y B se da una breve revisión del uso pozos de potencial delta regularizados para el estudio de sistemas superconductores 2D y 3D debido a que poseen *uno y solo un* estado ligado de energía. Mientras que para un sistema 1D es suficiente el tratamiento con el pozo de potencial delta. Los pozos de potencial delta aplicado a sistemas 2D y 3D tienen el inconveniente de tener un número infinito de estados ligados de energía, por lo que no son adecuados para mimetizar la interacción atractiva entre fermiones de conducción de los materiales superconductores 2D y 3D.

### 1.3 Diferencia entre Pares de Cooper (CP's) y Pares BCS

En esta sección se hace notar la diferencia entre los Pares de Cooper (CP's) de los pares BCS llamados “ordinarios”, donde los CP's se definen como aquellos pares fermiónicos cuyo momento de su centro de masa es distinto de cero ( $CMM \neq 0$ ), ver figura 1.5. Mientras que los “pares BCS” se definen como un dímero con momentos  $\mathbf{K}$  y  $\mathbf{k}$  fijos (o equivalentemente  $\mathbf{k}_1$  y  $\mathbf{k}_2$  fijos); el caso particular  $\mathbf{K} = 0$  (único caso considerado por modelo de interacción BCS) se trata en detalle en la referencia [2] y el hecho de que sus operadores de creación y aniquilación no satisfacen las relaciones usuales de conmutación de Bose se puede consultar en las referencias [3-7]. Por lo que es de esperarse que este tipo particular de pares no experimenten una BEC.

En contraste a los pares BCS, los CP's son considerados aquellos bosones que aun cuando no se han logrado construir operadores bosónicos (i.e., que satisfagan las reglas de conmutación de Bose) a partir de los operadores fermiónicos, si implican la estadística de Bose-Einstein pues en el límite termodinámico a un valor definido de  $\mathbf{K}$  le corresponde un número indefinido de valores permitidos de  $\mathbf{k}$  (vector de onda relativo). A cada valor definido de  $\mathbf{K}$  se definen a su vez un nivel de energía  $E_+(K)$  para CP's-2e o  $E_-(K)$  para CP's-2h (par de hoyos). Siendo esto todo lo necesario para asegurar la BEC u



ocupación macroscópica del estado fundamental que tiene lugar a temperaturas  $T$  por debajo de una cierta temperatura crítica  $T_c$  [7].

### 1.4 Pares de Cooper y su Condensación Bose-Einstein

Hasta hace poco tiempo se venía ignorando por completo (en el marco de la teoría BCS) el hecho de que un CP de electrones o de hoyos, en el límite de momentos pequeños del CMM, se comporta como un bosón sin masa parecido a un fotón o un fonón cristalino, ver figura 1.6. Pero que a diferencia del fotón o del fonón, consideradas partículas “efímeras” se conserva el número total de CP’s en un sistema de  $N$  fermiones idénticos, donde estos pares pueden considerarse permanentes al menos a la temperatura absoluta cero. Cuando estos CP’s se toman en cuenta en un modelo que es aplicado al estudio de un material superconductor es posible obtener diversos resultados y conclusiones que dependen tanto del acoplamiento del par como del medio en el cual se desplazan. Esto se discute con detalle en las secciones restantes del capítulo.

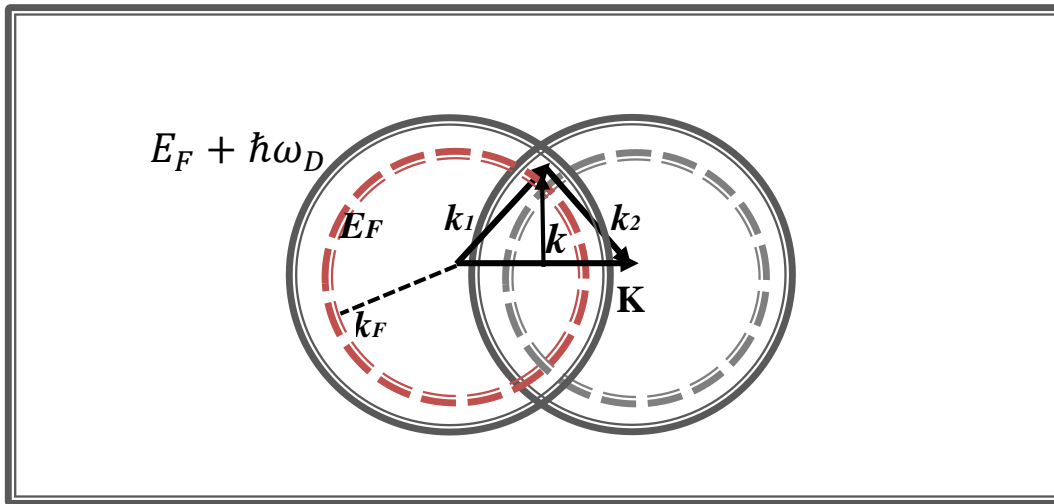


Figura 1.5 Números de onda  $\mathbf{k}_1$  y  $\mathbf{k}_2$  (asociados a los momentos lineales  $\mathbf{p}_1 \equiv \hbar\mathbf{k}_1$  y  $\mathbf{p}_2 \equiv \hbar\mathbf{k}_2$ ) de dos fermiones ligados en un CP con momento lineal total de su centro de masa  $\mathbf{P} = \hbar\mathbf{K} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ . Los fermiones interactúan atractivamente según el modelo de interacción BCS. [Figura tomada de la referencia 1].

Por ejemplo, es conocido el resultado que para sistemas de partículas de masa  $m$  que se comportan como bosones por debajo de una cierta temperatura crítica ( $T < T_c$ ), con una relación entre momento y energía (relación de dispersión) de tipo cuadrático  $\epsilon_K = mv^2/2 = p^2/2m = \hbar^2 K^2/2m$ , y que los bosones se encuentren en el vacío condicionan que la BEC solamente ocurrirá bajo tales condiciones para un sistema de dimensión  $d > 2$ . Por otro lado, S. Fujita y otros [8] han demostrado que para un gas de bosones permanentes (en contraste a los bosones efímeros como lo son el fotón o el fonón) con una relación lineal de dispersión (energía de excitación del par en función de  $K$ )  $\epsilon_K \xrightarrow{K \rightarrow 0} a(d) v_F \hbar K$ , este sistema puede sufrir una BEC en dimensiones mayores que 1. La aproximación lineal a la relación de dispersión para  $d = 2$  y 3 se discute en detalle en la referencia [9]. Que para el caso de acoplamiento débil se tienen los valores  $a(d) = 1, 2/\pi$  y  $1/2$  para un sistema de dimensión

$d = 1, 2$  y  $3$ , respectivamente. En tanto  $v_F$  es la velocidad máxima de un electrón o hueco móvil (velocidad de Fermi,  $v_F \approx 10^6 m/s$ ) y  $\hbar K$  el momento lineal del centro de masa del par cuasi-bosónico.

Más aún y significativamente, con este tipo de cuasi-bosones se consiguen temperaturas de transición  $T_c > 0$  no sólo para  $d = 2$  y  $3$  dimensiones sino para toda dimensionalidad  $d > 1$ , lo que incluiría los fenómenos superconductores “cuasi-unidimensionales” observados en las sales de Bechgaard, superconductores órgano-metálicos que están compuestos de cadenas moleculares paralelas entre sí y por lo tanto considerados sistemas  $(1 + \epsilon)$ -dimensionales. Este resultado evidentemente contrasta con el caso de la transición BE para bosones con masa y una energía de excitación  $\epsilon_K = \hbar^2 K^2 / 2m$  que sólo se produce si  $d > 2$ .

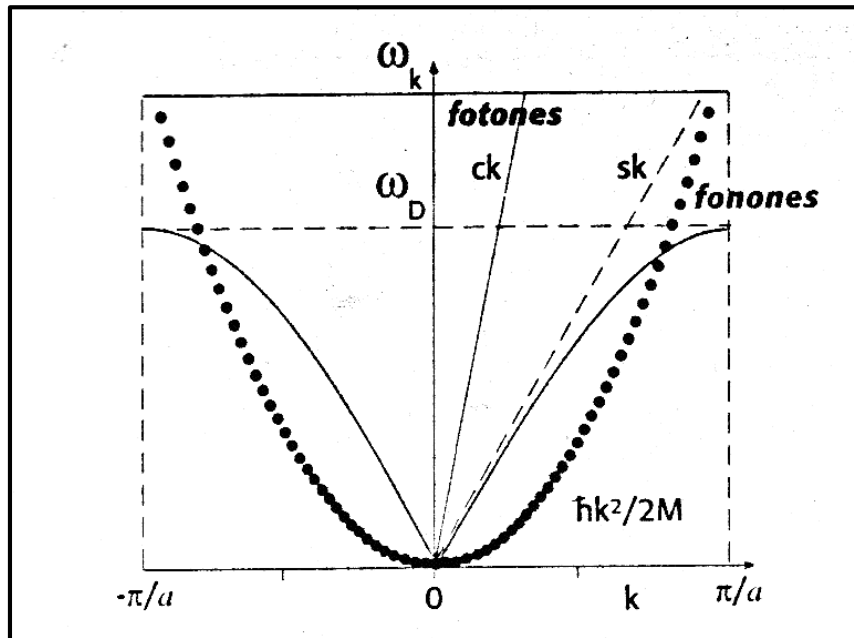


Figura 1.6 Frecuencias angulares ( $\omega_k$ ) de vibración de los modos normales de una cadena de masas discretas que simula la red iónica de un cristal, curva gruesa, llamada la “relación de dispersión” fonónica. Los momentos  $k$  están acotados entre  $-\pi/a$  y  $\pi/a$ , siendo  $a$  la distancia entre los iones de la red. La constante  $s$  asociada a la recta  $sk$  es la velocidad del sonido dentro del cristal (unos  $10^3$  metros por segundo). Esta recta  $sk$  es análoga a la relación fotónica  $\omega_k = ck$  con  $c$  la velocidad de la luz ( $\approx 3 \times 10^8$  metros por segundo). Nótese que en realidad (y esto no se refleja en la gráfica)  $c$  es  $\approx 3 \times 10^5$  veces  $s$ . La relación para fotones  $\omega_k = ck$  no es más que la relación  $E = \hbar\omega_k = c\hbar k = cp$  entre energía total  $E$  y el momento  $p$  acarreado por una onda electromagnética clásica. Esta misma relación vale también para el fotón (partícula sin masa) gracias a la fórmula de Planck  $E = \hbar\omega = h\nu$ , donde  $\nu$  es la frecuencia ordinaria y  $\omega$  la frecuencia angular. La curva punteada cuadrática corresponde a las frecuencias (léase, energías) posibles para una partícula de masa  $m$ . [Figura tomada de la referencia 1].

No obstante, resulta más realista manejar como modelo no un gas puro de bosones sino una mezcla en equilibrio químico [10] de fermiones no apareados y de cuasi-bosones compuestos de dos fermiones apareados mediante la interacción del modelo BCS. Las figuras 1.7 y 1.8 ilustran los resultados de considerar este modelo de interacción en los casos de interacción débil e interacción fuerte, donde los aros representan los  $Cp$ 's y los puntos a los fermiones desapareados que no se encuentran dentro del cascarón de espesor  $\hbar\omega_D$  que se muestra en la figura 1.5. Donde solamente una

pequeña fracción de fermiones acoplados por pares tendrá un comportamiento cuasi-bosónico, dicha fracción sería proporcional a la fracción del volumen de intersección de los dos cascarones sobre el volumen total de la esfera de Fermi de acuerdo con la figura 1.5. Este modelo de mezcla bosón-fermión resulta ser el modelo descrito cuantitativa y precisamente por la teoría BCS a la temperatura absoluta cero ( $T = 0 K$ ) cuando se considera nulo el número de fermiones desapareados a esta temperatura.

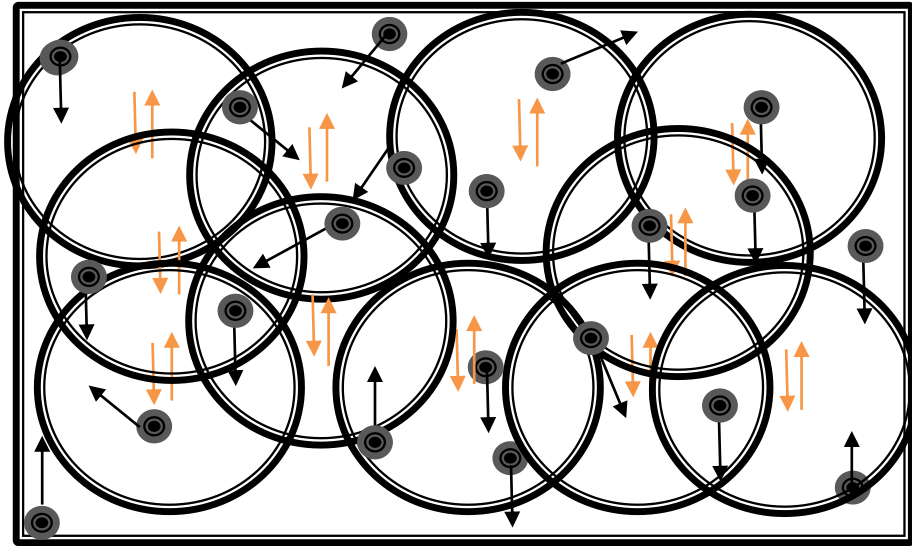


Figura 1.7 Mezcla de dos gases ideales, uno de fermiones no apareados (representado por “puntos”) y otro de cuasi-bosones (CP’s representados por “aros”) que se traslapan considerablemente entre sí, si la atracción de la interacción del modelo BCS es pequeña (acoplamiento débil). El par de flechas asociado a cada aro representan los espines del par fermiónico apareado [Figura tomada de la referencia 1].

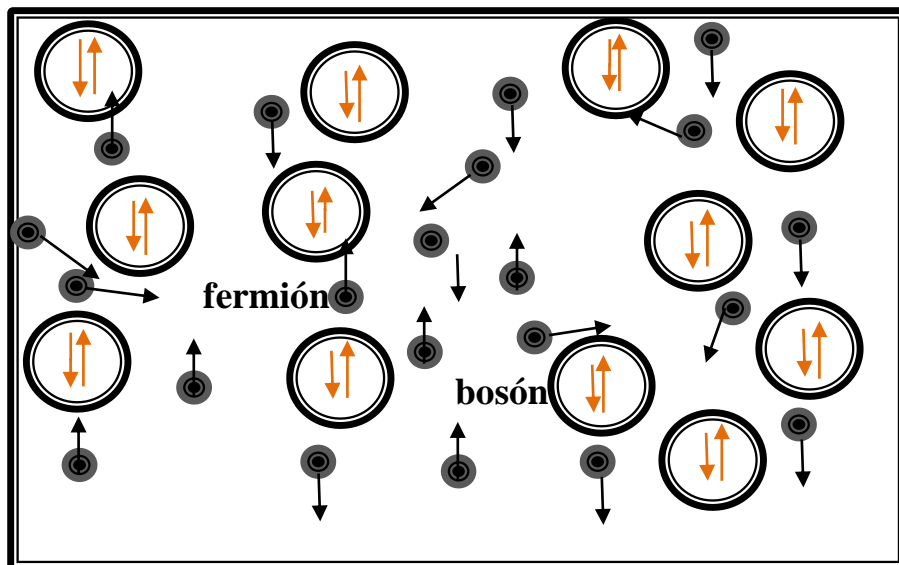


Figura 1.8 Igual que la figura 1.7, pero para el caso de acoplamiento fuerte. [Figura tomada de la referencia 1].

Otro ejemplo, es la aplicación del modelo bosón-fermión a un sistema 2D, donde se considera la mezcla en equilibrio químico de bosones permanentes y fermiones desapareados, dando como resultado la predicción de una temperatura de transición 25 veces mayor que la predicha por un gas puro de bosones permanentes acoplados débilmente con una energía de excitación  $\epsilon_K = a(d)v_F\hbar K$  para toda  $K > 0$ . Si el modelo de la mezcla bosón-fermión se modifica para considerar la posibilidad que los pares se rompan debido a los choques a partir de un valor crítico  $\hbar K_{01}$  del CMM, la  $T_c$  se verá afectada además por un factor de 3, llevando finalmente a temperaturas de transición extrañamente altas,  $T_c \simeq 1.443T_F$  en 2D y  $T_c \simeq 0.989T_F$  en 3D [11]. Lo que puede entenderse si se tiene en cuenta que estos valores tan elevados de  $T_c$  provienen de considerar superficies ideales de Fermi (esféricas en 3D y circulares en 2D) que corresponden a un gas de fermiones y bosones en ausencia de la red cristalina iónica subyacente presente en los materiales reales. Por lo que es de esperarse que al refinar el estudio utilizando las complicadas superficies reales correspondientes a un cristal verdadero, se inhibirá la formación de pares, lo que seguramente disminuirá la  $T_c$  hacia valores empíricos. Sin embargo, el nuevo enfoque de Fujita [8], que en esencia generaliza el formalismo BCS, amplía las perspectivas y esperanzas hacia el entendimiento del fenómeno superconductor a nivel electrónico y microscópico en el plano mecánico cuántico. Una vez logrado esto, se plantearán y formularán teorías detalladas con verdadero poder predictivo en la búsqueda de superconductores a temperaturas ambiente [11].

## 1.5 Gas Ideal Cuántico de Bosones Permanentes

En esta sección se considera el caso de un gas cuántico ideal de bosones “irrompibles” de masa  $m$  con una  $s$ -relación general de dispersión en  $d$ -dimensiones, para el cual el número total de bosones  $N_B$  del sistema está dado como la suma de la distribución BE sobre el número total de estados, y si denotamos con  $N_{B,0}(T)$  al número de bosones que se encuentran en el estado mínimo de energía  $E_K = 0$  en el límite termodinámico a la temperatura  $T$ , se tiene en forma explícita que [11]

$$N_B = N_{B,0}(T) + \sum_{K \neq 0} \frac{1}{\exp\beta(\epsilon_K - \mu_B) - 1} \quad (1.2)$$

donde  $\beta = 1/k_B T$  y  $\mu_B \leq 0$  es el potencial químico. Nótese que  $N_{B,0}(T)$  es ignorable comparado con  $N_B$  para  $T \geq T_c$ , mientras que  $N_{B,0}(T)$  será una fracción significativa de  $N_B$  para  $T < T_c$ , para  $T = T_c$  se satisface que  $N_{B,0}(T_c) \simeq 0$  y  $\mu_B \simeq 0$ , y para  $T = 0$  el último término de la ecuación (1.2) desaparece tal que  $N_B = N_{B,0}(0)$  (viz. ausencia de cualquier principio de exclusión).

La suma en (1.2) se puede transformar en una integral sobre las  $k \equiv |k|$  positivas, donde  $k$  es un vector  $d$ -dimensional. Haciendo esto para  $d > 0$

$$\sum_{k \neq 0} \rightarrow \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \int dk k^{d-1} \quad (1.3)$$

donde “ $\Gamma$ ” es la función gamma y el prefactor tomará los valores 2 para  $d = 1$ ,  $2\pi$  para  $d = 2$  y  $4\pi$  para  $d = 3$ .

Sea la  $s$ -relación de dispersión [10, 12]

$$\epsilon_k = C_s k^s, \quad s > 0 \quad (\text{Relación de dispersión}) \quad (1.4)$$

con  $\epsilon_k$  como la energía de excitación del bosón en función del número de onda  $k$ . Para los bosones ordinarios de masa  $m$  en el vacío se tiene que  $s = 2$  (cuadrática) y  $C_2 = \hbar^2/2m$ ; mientras que el caso de CP's en el mar de Fermi ( $s = 1$ , lineal) se discute a continuación.

Si se define la densidad del número de bosones en  $d$ -dimensiones como  $n_B \equiv N_B/L^d$  entonces la ecuación (1.2) para  $T \leq T_c$  será fácilmente evaluada en términos de las integrales de Bose [13], con  $z \equiv \exp(\mu_B/k_B T)$  como la fugacidad. Esto es

$$g_\sigma(z) \equiv \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^\infty dx \frac{x^{\sigma-1}}{z^{-1}e^x - 1} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{z^l}{l^\sigma} \xrightarrow{z \rightarrow 1} \zeta(\sigma) \quad (1.5)$$

donde  $\zeta(\sigma)$  es la función zeta de Riemann de orden  $\sigma$ . La función  $\zeta(\sigma) < \infty$  para  $\sigma > 1$ , mientras que la serie  $g_\sigma(1)$  diverge para  $\sigma \leq 1$ . Algunos valores numéricos de  $\zeta(\sigma)$  son:  $\zeta(2) = \pi^2/6 \simeq 1.645$ ,  $\zeta(3) \simeq 1.202$ ,  $\zeta(4) = \pi^4/90 \simeq 1.082$ .

Dado que el número total de bosones a la temperatura  $T$  está dado como  $N_B = N_{B,0}(T) + N_{B,K>0}(T)$ , con  $N_B \simeq N_{B,0}(0)$ . Al considerar el intervalo de temperaturas  $0 < T < T_c$  y utilizando las ecuaciones (1.2), (1.3) y (1.5), se obtiene la expresión [11]

$$\frac{N_{B,0}(T)}{N_{B,0}(0)} = 1 - [2^{d-1} \pi^{d/2} \Gamma(d/2) n_B]^{-1} \frac{\Gamma(d/s) g_{d/s}(1)}{s(\beta C_s)^{d/s}}. \quad (1.6)$$

Como para  $T = T_c$  se tiene que  $N_{B,0}(T_c)/N_{B,0}(0) = 0$ , de la ecuación (1.6) se obtiene

$$T_c = \frac{C_s}{k_B} \left[ \frac{s \Gamma(d/2) (2\pi)^d}{2\pi^{d/2} \Gamma(d/s) g_{d/s}(1)} \right]^{s/d} \quad (1.7)$$

que al sustituirse en la fracción condensada de la ecuación (1.6), ésta se reduce a [11]

$$\frac{N_{B,0}(T)}{N_{B,0}(0)} = 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{d/s}. \quad (1.8)$$

Note de la ecuación (1.7), que para  $0 < d \leq s$  (es decir  $d/s \leq 1$ ) implica que  $T_c = 0$  pues  $g_{d/s}(1) = \infty$ . Lo que se comprueba fácilmente, ya que en el caso de  $s = d$  da la conocida serie armónica  $g_1(1) = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots$ , la cual diverge; mientras que para  $d < s$ , claramente la serie  $g_{d/s}(1)$  diverge aún más. Esto implica por lo tanto, que la BEC no ocurre en un sistema con una  $s$ -relación de dispersión para los bosones cuando la  $d$ -dimensión del sistema es tal que  $d \leq s$ ; lo cual es consistente con el hecho bien conocido que la BEC no ocurre en un sistema con una relación de dispersión cuadrática si la dimensión del sistema es menor o igual a 2. Para el caso  $s = 2$ ,  $C_2 = \hbar^2/2m$  y  $d = 3$ , se tiene que las ecuaciones (1.7) y (1.8) tienen la forma [11]

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2 n_B^{2/3}}{mk_B [\zeta(3/2)]^{2/3}} \simeq \frac{3.31\hbar^2 n_B^{2/3}}{mk_B} \quad (1.9)$$

$$\frac{N_{B,0}(T)}{N_{B,0}(0)} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$$

ya que  $\zeta(3/2) \simeq 2.612$ . Note que la ecuación (1.9) nos muestra los resultados familiares para la BEC en 3D.

Por otro lado, como un ejemplo de la utilidad del modelo de un gas ideal cuántico de bosones permanentes, éste se ha aplicado (caso  $d = 2$ ) al estudio de los cupratos; dando como resultado que la forma de la gráfica para el calor específico en función de la temperatura, tanto para bosones como para fermiones, despliega la misma suavidad y singularidad que la gráfica obtenida a partir de los datos experimentales.

## 1.6 Gas de Bosones de Pares de Cooper con su Relación Lineal de Dispersión

Sin abandonar el mecanismo de interacción fermión-fonón modelado dado en la ecuación (1.1), S. Fujita en la referencia [14] sugiere que la superconductividad es tal vez una BEC en 2D o 3D de pares excitados ( $\hbar K > 0$ ) “preformados” cuando el sistema superconductor se encuentra a una temperatura  $T < T_c$ . En  $T = 0$  todos los pares están en reposo ( $K = 0$ ) y una mezcla de ambos tipos de bosones ( $K = 0$  y  $K > 0$ ) está presente para  $0 < T < T_c$ . Los pares en  $d$ -dimensiones tienen una energía de excitación positiva para acoplamiento débil, la cual puede escribirse en términos de su energía de enlace  $\Delta_K$  en la forma [9]

$$\epsilon_K \equiv \Delta_0 - \Delta_K \xrightarrow{K \rightarrow 0} a(d)v_F\hbar K \quad (1.10)$$

con la energía de enlace del par  $\Delta_0 = 2\hbar\omega_D / (\exp[2/\lambda] - 1)$  para  $K = 0$ , mientras  $\lambda \equiv g(E_F)V \equiv N(0)v_0$  es una constante adimensional de acoplamiento con  $g(\epsilon)$  como el número de estados fermiónicos por unidad de energía por cada espín; y  $v_0$  se define como la intensidad de acoplamiento o atracción neta entre electrones por volumen  $d$ -dimensional ( $L^d$ ). Este resultado fue citado por primera vez en la referencia [15] para 3D. Por otro lado, los modelos colectivos en un superconductor han sido indicados y discutidos desde 1950 por Bogoliubov, Tolmachev, Shirkov, Nambu, Anderson, Rickayzen, y por Bardasis y Schrieffer. Es posible una revisión del tratamiento más reciente por Belkhir y Randeria [16]. No obstante, no trataremos con “modos colectivos” sino con pares de Cooper (con momentos de centros de masa  $\neq 0$ ) los cuales pueden tener una BEC mientras que los modos colectivos (fonones sónicos, plasmones, etc.) no pueden.

Utilizando las ecuaciones (1.4), (1.7) y  $C_s = a(d)v_F\hbar$  para  $s = 1$ , se obtiene la fórmula de  $T_c$  para acoplamiento débil en  $d$ -dimensiones [11]

$$T_c = \frac{a(d)v_F\hbar}{k_B} \left[ \frac{\pi^{(d+1)/2} n_B}{\Gamma[(d+1)/2] g_d(1)} \right]^{1/d} \quad (1.11)$$

## 1.7 Gases de Pares de Cooper *Rompibles e Irrompibles*

Por el momento se ha ignorado el hecho de que a partir de un cierto valor de  $K$  ( $K_{01}$ ) los pares se empiecen a desasociar, es decir, los pares con  $K > K_{01}$  se rompen. Donde [11]  $K_{01} = \Delta_0/a(d)\hbar v_F$  se determina al considerar que  $\Delta_{K_{01}} \equiv 0$ , de acuerdo con la ecuación (1.10).

Por otro lado, si se utiliza el resultado de la ecuación (1.11) es posible obtener los resultados para  $T_c$  de la referencia [14],  $T_c = 1.244\hbar k_B^{-1} v_F n_B^{1/2}$  en 2D y  $T_c = 1.009\hbar k_B^{-1} v_F n_B^{1/3}$  en 3D. Puede observarse del resultado de la ecuación (1.11) que  $T_c > 0$  para  $d > 1$ , un resultado de posible relevancia en la comprensión de la superconductividad como una BEC en un material orgánico cuasi 1D [17]. Los superconductores orgánicos incluyen materiales  $(1 + \epsilon)$ - $d$  tales como las sales de Bechgaard, materiales  $(2 + \epsilon)$ - $d$  como las sales *ET* y totalmente 3D como los cristales de fullereno dopados con alcalinos y alcalinos térreos llamados “*fulleritas*” superconductoras [18]. Los sistemas  $(1 + \epsilon)$ - $d$  y  $(2 + \epsilon)$ - $d$  están constituidos de átomos que conforman respectivamente cadenas y planos paralelos.

De acuerdo con la ecuación (1.3) y que el número de fermiones  $N = 2 \sum_k \theta(k_F - k)$ , donde  $\theta(x)$  es la función escalón de Heaviside, se tiene que para un sistema de  $d$ -dimensiones la densidad del número de fermiones está dada como [11]

$$n = \frac{k_F^d}{2^{d-2} \pi^{d/2} d \Gamma(d/2)}. \quad (1.12)$$

Por otro lado, el número de bosones  $N_{B,0}(0)$  formado a  $T = 0$  por medio de la interacción dada en la ecuación (1.1) es precisamente  $g(E_F)\hbar\omega_D$ , donde [19]

$$g(\epsilon) \equiv \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \frac{d^d k}{d\epsilon^d} = \left(\frac{m^*}{2\pi\hbar^2}\right)^{d/2} \frac{L^d \epsilon^{(d/2)-1}}{\Gamma(d/2)} \quad (1.13)$$

con  $m^*$  como la masa efectiva del fermión. Cuando se considera que todos los fermiones están apareados se tiene  $n_B/n = 1/2$ . Por otro lado, como  $n_B = g(E_F)\hbar\omega_D/L^d$  se tiene de las ecuaciones (1.12) y (1.13) que

$$\frac{n_B}{n} = \frac{\hbar\omega_D d}{4E_F} = \left(\frac{d}{4}\right) v \quad (1.14)$$

dado que  $k_F^d = (2m^*E_F)^{d/2}/\hbar^d$  y definiendo el alcance de interacción como  $v \equiv \hbar\omega_D/E_F$ . Lo que es una fracción mucho menor que 1/2, pues típicamente  $\hbar\omega_D \ll E_F$ . Esto permite reescribir a la ecuación (1.11) como

$$\frac{T_c}{T_F} = 2a(d) \left[ \frac{v}{2\Gamma(d)\zeta(d)} \right]^{1/d} \quad (1.15)$$

la cual se deduce al considerar un gas puro de pares irrompibles. En particular para  $d = 2$  con  $a(2) = 2/\pi$  y  $n_B/n = v/2$ , de la ecuación (1.15) se obtiene el resultado

$$\frac{T_c}{T_F} = \frac{4\sqrt{6}}{\pi^2} \sqrt{\frac{n_B}{n}} = \frac{4\sqrt{3}}{\pi^2} \sqrt{v} \simeq 0.702\sqrt{v} \quad (1.16)$$

para un gas puro de pares irrompibles en 2D.

Si ahora se considera la posibilidad de que los pares se puedan romper cuando  $\Delta_K < 0$  para toda  $K > K_{01}$ , y utilizando la relación de dispersión de la ecuación (1.10) se encuentra que la ecuación (1.3) debe integrarse desde  $K = 0$  hasta  $K_{01}$ . Obteniéndose de esto, que la temperatura crítica para un gas puro de pares rompibles de un sistema de dimensión  $d \geq 1$  [11] tiene la forma

$$\frac{T_c}{T_F} \cong v a^d (d)(d-1) \left( \frac{\exp[2/\lambda] - 1}{v} \right)^{d-1} \begin{matrix} \xrightarrow{d>1, \lambda \rightarrow 0} \infty \\ \xrightarrow{d=1, \lambda > 0} 0 \end{matrix} \quad (1.17)$$

Nótese que para  $d = 1$ ,  $T_c/T_F = 0$  para cualquier  $\lambda$ . El resultado de (1.17) no es extraño, pues si el acoplamiento se va reduciendo en forma gradual también  $K_{01}$  desaparece pero más rápidamente, lo que implica que todos los pares son bosones con  $K = 0$  y que el sistema se encuentra en un estado BEC para toda temperatura finita  $T$ .

Para terminar esta sección introducimos el concepto de energía de condensación, la energía de condensación es el cambio de energía de un sistema de muchos fermiones en estado fundamental ( $E_n$ ) a la energía correspondiente del sistema en el estado superconductor ( $E_s$ ). La energía de condensación BCS tiene la expresión [11]

$$E_s - E_n = -g(E_F) \hbar \omega_D \frac{2\hbar \omega_D}{\exp(2/\lambda) - 1} = -N_{B,0}(0) \Delta_0 \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} -\frac{1}{2} g(E_F) \Delta^2 \quad (1.18)$$

donde  $\Delta \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 2\hbar \omega_D \exp(-1/\lambda)$  es la energía de la brecha BCS a la temperatura cero. Lo que muestra que el cambio de energía es justamente la superposición de las energías de enlace  $\Delta_0$  de los  $N_{B,0}(0)$  pares y la cual es válida para cualquier acoplamiento.

## 1.8 Modelo Binario Simple Ideal Bosón-Fermión

En este modelo se considera una mezcla ideal de fermiones desapareados y pares rompibles con una relación lineal de dispersión, para la cual el rompimiento-térmico del par está explícitamente permitido. Si se denota con  $N$  al número total de fermiones del sistema, el cual consiste de  $N_1$  fermiones no interactuantes (fermiones inapareables) y  $N_2$  fermiones interactuantes o apareables. A la temperatura  $T$ ,  $N_1$  será justamente el número de fermiones debajo del cascarón esférico de interacción (en el  $k$ -espacio) de grosor  $\hbar \omega_D$  implícito en la figura 1.5; mientras  $N_2$  será el número dentro del cascarón esférico. Dado que los fermiones individuales no apareados obedecen la distribución usual de Fermi-Dirac con un potencial químico fermiónico  $\mu$ , se tiene que el número de fermiones apareables a la temperatura  $T$  estará dado como [11]



$$N_2(T) = 2 \int_{\mu - \hbar\omega_D}^{\mu + \hbar\omega_D} d\varepsilon \frac{g(\varepsilon)}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu)] + 1} \simeq 2g(\mu) \int_{\mu - \hbar\omega_D}^{\mu + \hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\exp[\beta(\varepsilon - \mu)] + 1} = 2g(\mu)\hbar\omega_D. \quad (1.19)$$

Que para el caso 2D es exacto e independiente de  $T$ , pues  $g(\varepsilon)$  es constante. Más aún, si  $\hbar\omega_D/\mu \ll 1$ , la ecuación (1.19) es una buena aproximación para  $d \neq 2$ .

Por otro lado, la *ecuación de número* (1.19) para fermiones apareables también se puede escribir como [11]

$$N_2(T) = N_{20}(T) + 2[N_{B,0}(T) + N_{B,0 < K < K_{01}}(T)] \quad (1.20)$$

donde  $N_{20}(T)$  es el número pareable de fermiones desapareados y  $N_{B,0}(T)$  es el número de pares bosónicos con CMM igual a cero.

Un modelo simple bosón–fermión se sigue al considerar

$$N_{20}(T) = 2N_{B,K_{01} < K < K_{max}}(T) \quad (1.21)$$

y afirmando que los fermiones apareables pero desapareados son precisamente los bosones rotos con  $K_{01} < K < K_{max}$ , donde  $K_{max} \equiv 2k_F\sqrt{1 + \nu}$  es el mayor valor de  $K$  más allá del cual la interacción dada en la ecuación (1.1) desaparece [20]. Note que el resultado de la ecuación (1.21) desaparece conforme  $T \rightarrow 0$  tal que  $N_2(0) \equiv 2N_{B,0}(0)$ , es decir, que a la temperatura  $T = 0$  todos los fermiones apareables están apareados. De las ecuaciones (1.19) y (1.21), la *ecuación de número* (1.20) nos permite escribir

$$g(\mu)\hbar\omega_D = N_{B,0}(0) = N_{B,0}(T) + N_{B,0 < K < K_{01}}(T) + N_{B,K_{01} < K < K_{max}}(T). \quad (1.22)$$

Usando las mismas técnicas para encontrar (1.7), a partir de la ecuación (1.22) y considerando que  $N_{B,0}(T) \simeq 0$  y  $\mu_B \simeq 0$ , es posible determinar la ecuación (de tipo trascendente) para la temperatura crítica  $T_c^{mez}$  de este modelo. Esta expresión resulta ser casi equivalente a la ecuación (1.11), ecuación para la temperatura crítica  $T_c$  del modelo [14] correspondiente a un gas puro de bosones irrompibles y con relación lineal de dispersión. Al manipular esta ecuación trascendente es posible expresar a  $T_c^{mez}$  como una expansión [11]

$$T_c^{mez} = T_c \left\{ 1 + \frac{[4a(d)\sqrt{1 + \nu}T_F/T_c^{mez}]^{d-1}}{d\Gamma(d)\zeta(d)} \exp[-4a(d)\sqrt{1 + \nu}T_F/T_c^{mez}] + \dots \right\} \quad (1.23)$$

donde  $T_c$  es la misma que se da en la ecuación (1.15). Para esta expansión se ha supuesto que  $\mu \simeq E_F$  para cualquier  $d$ -dimensión y  $\nu \ll 1$  para  $d \neq 2$ . El término de corrección de la ecuación (1.23) suele ser pequeño y de valor aproximado a  $2 \times 10^{-7}$  para un sistema 2D, cuando se usa la ecuación (1.16) con los valores  $\nu = 0.05$  y  $\mu(T)/E_F = 1 - (T/T_F)\ln\{1 + \exp[-\mu(T)/k_B T]\}$  evaluada [21] en  $T = T_c$ , esto es  $\mu(T_c) \simeq 0.9997E_F$ . Y es aproximadamente  $7 \times 10^{-13}$  en el caso 3D utilizando la ecuación (1.15) con el valor  $\nu = 0.001$ .

Puede observarse de la ecuación (1.23), que en contraste a la temperatura infinita  $T_c$  dada en la ecuación (1.17) para un gas puro de pares rompibles, la simple presencia de fermiones inapareados en estado fundamental ha conducido a  $T_c$ 's de valor finito aun cuando todos los pares siguen siendo únicamente bosones con  $K = 0$  y de acoplamiento débil dentro de la mezcla.

En la figura 1.9 se muestra la gráfica de  $T_c/T_F$  contra la  $d$ -dimensión ( $1 \leq d \leq 3$ ) en los siguientes casos: (a) bosones ordinarios con su relación cuadrática de dispersión,  $m = 2m^*$  y  $n_B/n = \Theta_D d/4T_F \equiv \nu d/4$  con  $\nu = 0.05$  (curva llena y delgada);  $\nu = 0.001$  (curva llena y gruesa), así como el caso  $n_B/n = 1/2$ , caso en el cual se supone que todos los fermiones están apareados (curva punteada); (b) pares de Cooper con su relación lineal de dispersión, considerando los valores  $\nu = 0.05$  (curva delgada interrumpida) y  $\nu = 0.001$  (curva gruesa interrumpida).

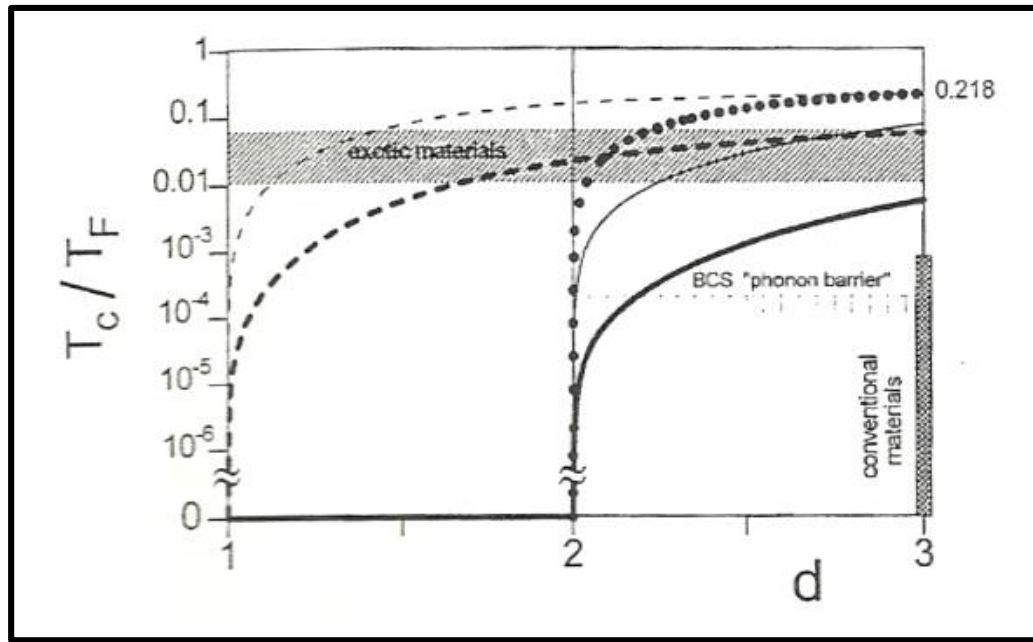
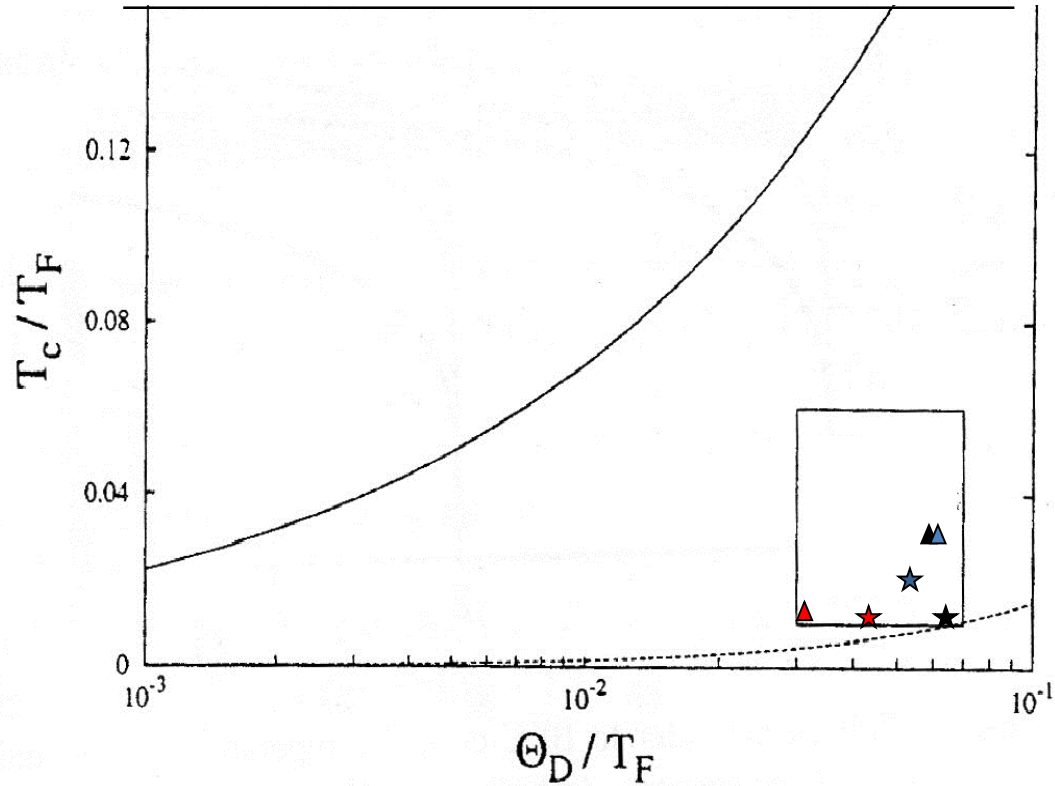


Figura 1.9 Las curvas llenas se refieren a las temperaturas críticas  $T_c$  para BEC (en unidades de  $T_F$ ) en  $d$  dimensiones de acuerdo a (8) con  $s = 2$ , las curvas a trazos a (12), donde  $n_B/n = d\Theta_D/4T_F$ ,  $m = 2m^*$ . Las curvas delgada y gruesa se refieren a  $\Theta_D/T_F = 0.05$  y  $0.001$ , respectivamente. La curva punteada se refiere a (8) con  $s = 2$ ,  $n_B/n = 1/2$  y  $m = 2m^*$ , pensando que todos los fermiones están apareados, el valor de  $0.218$  en  $d = 3$  nos da un resultado familiar. Las zonas sombreadas clara y oscura señalan los datos para materiales superconductores exóticos de Uemura [22] y convencionales, respectivamente. La línea horizontal delgada marcada con "barrera fonónica" de BCS corresponde a la fórmula BCS para  $T_c$  con  $\lambda \leq 1/2$ , concretamente  $T_c/T_F \leq (1.13e^{-2}) \Theta_D/T_F \approx 0.153 \Theta_D/T_F$  para el caso  $\Theta_D/T_F = 10^{-3}$ . [Figura tomada de la referencia 11].

En la figura 1.10 se muestran los valores de la temperatura crítica  $T_c^{mez}$  del modelo simple bosón-fermión de un sistema 2D, normalizadas en términos de  $T_F$ . Dado que para acoplamiento débil se tiene que  $T_c^{mez} \approx T_c$ , en realidad se está graficando la ecuación (1.15) con  $d = 2$  (curva llena). En la figura 1.10 esta gráfica es comparada con el resultado BCS,  $T_c = 1.13\Theta_D \exp(-1/\lambda)$  para  $\lambda = 1/2$ ,

ambas como función  $\nu \equiv \Theta_D/T_F$ . Los valores empíricos [22, 23] de  $T_c$  para el cuprato están dentro del rectángulo mostrado.

Es posible la obtención y predicción de temperaturas críticas menores mediante el modelo simple bosón-fermión cuando se consideran: (a) reducciones en  $n_B$  debido al uso de superficies de Fermi más realistas de tipo no esférico, lo que necesariamente reduce el número de fermiones apareables y en consecuencia el número de pares, y (b) la extensión del alcance de interacción entre pares, lo que también será un factor que disminuya el valor de  $T_c$ , como ocurre en un líquido helio-cuatro donde las interacciones reducen por casi un 30% [24] el valor de  $T_c$  correspondiente al gas ideal.



$YBa_2Cu_3O_7$  (estrella negra),  $YBa_2Cu_4O_{8.5}$  (estrella roja),  $Bi_2Sr_2CaCu_3O_8$  (estrella azul),  
 $Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$  (triángulo negro),  $HgBa_2Ca_2Cu_3O_8$  (triángulo azul) y chevreel  
(triángulo rojo).

Figura 1.10 Gráfica de  $T_c/T_F$  contra  $\Theta_D/T_F$  para el modelo simple 2D bosón-fermión [equivalente al al valor 2D en (1.16) como se discutió,  $d = 2$ ] (curva llena). La curva a trazos es el resultado maximal BCS  $T_c = 1.13\Theta_D e^{-1/\lambda}$  para  $\lambda = 1/2$ . El rectángulo abarca los datos empíricos para los cupratos superconductores [22]. [Figura tomada de la referencia 11].

## CAPÍTULO 2

### BRECHA BCS

#### 2.1 Deducción Heurística de la Brecha (“gap”) de un Superconductor BCS a $T = 0$

En esta sección se introducirá el concepto de brecha de un superconductor, concepto que facilita la comprensión y estudio de un sistema de muchos electrones que interactúan atractivamente entre sí, venciendo su repulsión eléctrica mediante el intercambio de fonones de energía  $\hbar\omega_D$  (aproximación BCS), la cual está relacionada a la energía de corte asociada a determinados modos de vibración de la red cristalina.

Puesto que nuestro interés se centra en el estado superconductor que suelen presentar determinados materiales, primero determinamos la energía asociada a tal estado. Para esto será necesario dar las siguientes definiciones e identidades:

$\mathbf{K} \equiv$  el estado de dos electrones interactuando atractivamente, tal que los estados internos del par son  $\mathbf{k}$  y  $-\mathbf{k}$ . De modo que el momento total del par será  $\mathbf{K} \equiv \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k} - \mathbf{k} = 0$ .

$v_k^2 \equiv$  es la probabilidad de que los estados del par  $k$  estén ocupados.

$1 - v_k^2 \equiv$  la probabilidad de que los dos estados del par estén desocupados.

$2 \sum_k \epsilon_k v_k^2$  es la energía cinética de los pares.

$N = 2 \sum_k v_k^2$  es el número fijo de electrones.

En la aproximación BCS, la interacción atractiva entre electrones equivalente a la dada en la ecuación (1.1) está dada como

$$V_{kk'} = \begin{cases} -V & \text{si } -\hbar\omega_D < \epsilon_k, \epsilon_{k'} < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (2.1)$$

Así, para una transición  $k \rightarrow k'$  se requiere inicialmente que el estado  $k$  del par esté lleno y el estado del par  $k'$  esté vacío, por lo que la probabilidad de dicha transición es proporcional a  $v_k^2(1 - v_{k'}^2)$  y la probabilidad de que ocurra la transición opuesta será proporcional a  $v_{k'}^2(1 - v_k^2)$ .

De acuerdo con lo anterior, la energía del estado superconductor está dada como

$$E_S = \sum_k' \epsilon_k v_k^2 - V \sum_k' \sum_{k'}' [v_k^2(1 - v_{k'}^2)v_{k'}^2(1 - v_k^2)]^{1/2} \quad (2.2)$$

donde la notación  $\sum'$  indica que la suma excluye los términos con  $k = 0$  y  $k' = 0$ ,  $\epsilon_k = \epsilon_k - \mu$ ,  $\epsilon_k$  es la energía cinética para una partícula y  $\mu$  es el potencial químico.  $E_S$  será mínima para un determinado valor de  $v_k^2$ , por lo que será necesario calcular

$$\frac{\partial E_S}{\partial v_l^2} = \sum_k' \varepsilon_k \delta_{lk} - (1/2)V \sum_k' \sum_{k'}' \left[ \frac{\sqrt{v_{k'}^2(1-v_{k'}^2)(1-2v_{k'}^2)}}{\sqrt{v_k^2(1-v_k^2)}} \right] \delta_{lk} \quad (2.3)$$

donde  $\delta_{lk}$  es la delta de Kronecker, cuyo valor es cero si  $l \neq k$  y 1 cuando  $l = k$ . Si definimos

$$\Delta \equiv V \sum_{k'}' \sqrt{v_{k'}^2(1-v_{k'}^2)} \quad (2.4)$$

y después de un poco de álgebra, se encuentra que los valores  $v_k^2$  que satisfacen la ecuación (2.3) son

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 \pm \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}} \right] \quad (2.5)$$

de los cuales, la solución que hace mínima la energía del estado superconductor es

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}} \right] \quad (2.6)$$

valor que al sustituirse en la ecuación (2.4) se obtiene

$$1 = \frac{V}{2} \sum_k' \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}}. \quad (2.7)$$

Transformando la sumatoria de la ecuación (2.7) en integral se tiene

$$1 = \frac{V}{2} \frac{L^d}{(2\pi)^d} \int d^d k \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} = \frac{v_0 N(0)}{2} \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \quad (2.8)$$

de manera que la ecuación (2.8) tiene las siguientes expresiones para  $d = 1, 2$  y  $3$

$$1 = \left(\frac{v_0}{2}\right) \left(\frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E_F}}\right) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \quad d = 1 \quad (2.9)$$

$$1 = \left(\frac{v_0}{2}\right) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \quad d = 2 \quad (2.10)$$

$$1 = \left(\frac{v_0}{2}\right) \left(\frac{1}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\frac{m^3 E_F}{2}}\right) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \quad d = 3 \quad (2.11)$$

donde se han utilizado los valores de  $N(0)$  que se presentan en la Tabla I [25].

Retomando e integrando la ecuación (2.8) se obtiene

$$\frac{\hbar\omega_D}{\Delta} = \text{senh}(2/v_0 N(0)) \quad (2.12)$$

resultado que se simplifica para el caso de acoplamiento débil (esto es  $\Delta \ll \hbar\omega_D$ ). Dado que la aproximación asintótica para el seno hiperbólico es  $\text{senh}x \equiv (e^x - e^{-x})/2 \xrightarrow{x \rightarrow \infty} e^x/2$ , al definir  $\lambda \equiv v_0 N(0)/2$  la ecuación (2.12) se puede expresar como

$$\Delta \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 2\hbar\omega_D \exp[-2/v_0 N(0)]. \quad (2.13)$$

Lo cual coincide con el resultado familiar  $\Delta \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} 2\hbar\omega_D \exp(-1/\lambda)$ . En la siguiente sección mediante el uso de la tabla I y de  $V_{kk'}$  se determinan los valores de  $\lambda$  para 1, 2, 3-dimensiones. Tanto para el caso fonónico como el no fonónico (e.g., excitón, magnón, plasmón, etc...).

$d$	$n$	$N(0)$
1	$2k_F / \pi$	$\frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E_F}}$
2	$k_F^2 / 2\pi$	$\frac{m}{2\pi\hbar^2}$
3	$k_F^3 / 3\pi^2$	$\frac{1}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\frac{m^3 E_F}{2}}$

**TABLA I.** La densidad electrónica  $n$  y la densidad de estados  $N(0)$  por estado de espín por unidad  $L^d$ , a la energía de Fermi  $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ , como una función de la dimensión  $d$  del sistema [Tabla tomada de la referencia 25].

## 2.2 Solución Analítica de la Ecuación de la Brecha BCS en $d = 1, 2$ y $3$ Dimensiones a $T = 0$

En esta sección, se obtienen las expresiones analíticas de la brecha BCS para sistemas de muchos electrones con el modelo de interacción BCS en una, dos y tres dimensiones; en el límite de acoplamiento débil, pero con un ancho arbitrario de interacción  $\nu = \hbar\omega_D/E_F$ ,  $0 < \nu < \infty$ . Donde  $\hbar\omega_D$  es la energía máxima de un fonón que actúa como la fuerza atractiva mediadora entre un par de electrones, y  $E_F$  es la energía de Fermi. Los resultados que aquí se presentan sólo consideran el mecanismo de apareamiento fonónico ( $\hbar\omega_D/E_F \ll 1$ ) entre electrones así como el mecanismo no fonónico ( $\hbar\omega_D/E_F > 1$ ) donde las energías del fonón mediador no son pequeñas comparadas con  $E_F$  [25].

El modelo de interacción BCS entre electrones para el sistema fonón-electrón en  $d$ -dimensiones está dado como

$$V_{kk'} = \begin{cases} -\nu_0/L^d, & \max(0, E_F - \hbar\omega_D) < \epsilon_k, \epsilon_{k'} < E_F + \hbar\omega_D \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (2.14)$$

con  $L^d$  como el tamaño del sistema,  $\nu_0 > 0$  es la intensidad de acoplamiento o atracción neta entre electrones,  $\epsilon_k \equiv \hbar^2 k^2/2m$  es la energía cinética para una partícula y  $E_F = \hbar^2 k_F^2/2m$  es la energía de Fermi. La cual se determina por la densidad electrónica  $n$  en  $d$ -dimensiones (ver tabla I).

En particular para los superconductores metálicos, el alcance de interacción (en unidades de la energía de Fermi) se define y satisface la condición

$$\nu \equiv \hbar\omega_D/E_F \ll 1 \quad (2.15)$$

con solución analítica para la brecha, en el límite de acoplamiento débil ( $\lambda \rightarrow 0$ )

$$\Delta/E_F = (2\hbar\omega_D/E_F) \exp(-1/\lambda) \quad (2.16)$$

donde  $\lambda$  es el factor adimensional de acoplamiento que se define como

$$\lambda \equiv \nu_0 N(0) \quad (2.17)$$

y  $N(0)$  es la densidad electrónica de estados por espín en la superficie de Fermi.

Si bien, el modelo para explicar la superconductividad basado en un bosón mediador entre un par fermiónico que compone un par de Cooper no describe en forma aceptable a los superconductores exóticos (incluyendo altas temperaturas). Una teoría como BCS puede seguir aplicándose a éstos si se considera que los fermiones que componen los bosones intercambian partículas mediadoras que no son fonones (pseudofonón). Y al resolver la ecuación de la brecha BCS en una, dos y tres dimensiones; ya no se considera la restricción dada en la ecuación (2.15).

A continuación se demuestra que independientemente del valor de  $\hbar\omega_D/E_F$ , el parámetro de la brecha BCS puede ser escrito en la forma [25]

$$\Delta/E_F = f_d(\hbar\omega_D/E_F) \exp(-1/\nu_0 N(0)) \quad (2.18)$$

donde  $f_d(\hbar\omega_D/E_F)$  es una función analítica que depende de la dimensión del sistema superconductor y cuya expresión en cada dimensión se muestra en la tabla II.

De acuerdo con la teoría BCS, a la temperatura  $T = 0$  la ecuación de la brecha está dada como [25]

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\Delta_{k'}^2 + \epsilon_{k'}^2}} \quad (2.19)$$

la cual expresada  $d$ -dimensiones tiene la forma

$$1 = \frac{\nu_0}{2L^d} \sum_k \frac{\theta(\hbar\omega_D - |\epsilon_k|)}{\sqrt{\Delta^2 + \epsilon_k^2}} \quad (2.20)$$

con  $\theta(x)$  como la función escalón de Heaviside.

En general, la brecha  $\Delta$  y el potencial químico  $\mu$  se determinan simultáneamente al resolver la ecuación (2.20) y la ecuación de número [25]

$$N = \sum_k \left( 1 - \frac{\epsilon_k}{\sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2}} \right). \quad (2.21)$$

Observe que para acoplamiento débil ( $\Delta/E_F \ll 1$ ) puede ignorarse  $\Delta_k$  en (2.21), lo cual implica que  $\mu \approx E_F$ . Por lo que en este caso  $\mu$  es reemplazado por la energía de Fermi  $E_F$ . Haciendo uso de  $\sum_k \rightarrow (L/2\pi)^d \int d^d k$  para convertir la sumatoria de la ecuación (2.20) en una integral, se obtiene

$$1 = \frac{\nu_0}{2(2\pi)^d} \int d^d k \frac{\theta(\hbar\omega_D - |\epsilon_k|)}{\sqrt{\Delta^2 + \epsilon_k^2}}. \quad (2.22)$$

Como la energía cinética de una partícula debe ser positiva, se distinguen dos casos

(a) si  $\hbar\omega_D/E_F < 1$ , la región de integración en la energía es simétrica y está dada por

$$E_F - \hbar\omega_D < \epsilon_k < E_F + \hbar\omega_D. \quad (2.23)$$

(b) Si  $\hbar\omega_D/E_F > 1$ , la región de integración en la energía es asimétrica y está dada como

$$0 < \epsilon_k < E_F + \hbar\omega_D. \quad (2.24)$$



Sujeta a cualquiera de estas condiciones, es posible resolver analíticamente la ecuación (2.22) en una, dos y tres dimensiones.

Transformando la ecuación (2.22) para la brecha BCS en una integral sobre la energía, se obtiene

$$1 = \frac{\nu_0 N(0)}{2} \int_{E_F - \hbar\omega_D, 0}^{E_F + \hbar\omega_D} d\epsilon \frac{(\epsilon/E_F)^{(d-2)/2}}{\sqrt{\Delta^2 + (\epsilon - E_F)^2}} \quad (2.25)$$

la cual puede separarse en dos partes

$$\frac{2}{\nu_0 N(0)} = \int_{1-\nu, 0}^{1+\nu} \frac{d\bar{\epsilon}}{\sqrt{\delta^2 + (\bar{\epsilon} - 1)^2}} + \int_{1-\nu, 0}^{1+\nu} d\bar{\epsilon} \frac{\bar{\epsilon}^{(d-2)/2} - 1}{\sqrt{\delta^2 + (\bar{\epsilon} - 1)^2}} = I + I_D \quad (2.26)$$

donde la energía ha sido expresada en unidades de  $E_F$ , esto es  $\epsilon/E_F = \bar{\epsilon}$ . En ambas integrales el límite inferior se refiere a las condiciones dadas en las ecuaciones (2.23) o (2.24) y del orden del alcance de interacción  $\Delta/E_F$ . Por último, una vez resuelta la ecuación (2.26) y después de una inversión, se obtiene una expresión de la forma [25]

$$\Delta/E_F = f_d(\hbar\omega_D/E_F) \exp(-1/\nu_0 N(0)). \quad (2.27)$$

Donde las funciones  $f_d(\hbar\omega_D/E_F)$  dependientes de la  $d$ -dimensión están dadas en la tabla II, coincidiendo los resultados obtenidos con los datos de la tabla II de la ref. [25].

$d$	$f_d(\nu), \nu \leq 1.$	$f_d(\nu), \nu > 1.$
1	$(8/\nu)(\sqrt{1+\nu}-1)(1-\sqrt{1-\nu})$	$(8/\sqrt{\nu})(\sqrt{1+\nu}-1)$
2	$2\nu$	$2\sqrt{\nu}$
3	$(8/\nu)(\sqrt{1+\nu}-1)(1-\sqrt{1-\nu})\exp(\sqrt{1+\nu}+\sqrt{1-\nu}-2)$	$(8/\sqrt{\nu})(\sqrt{1+\nu}-1)\exp(\sqrt{1+\nu}-2)$

**TABLA II.** Las expresiones  $f_d(\nu)$ , que dan la forma analítica para la brecha BCS (2.27), como función de la  $d$ -dimensión del sistema.

### 2.3 Ecuación de la Brecha BCS para $T \leq T_c$ ( $T \simeq T_c$ )

En esta sección obtenemos la ecuación de la brecha en función de la temperatura, para lo cual solamente modificamos la ecuación (2.19) de la sección anterior, introduciendo el factor  $g(E_k) = 1 - 2f(E_k)$  que representa la probabilidad de que el CP (par de Cooper) no esté en el estado  $E_k \equiv \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2(T)}$  y  $f(E)$  es la función de distribución Fermi [26]. De acuerdo con esto se puede escribir

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\Delta_{k'}^2 + \varepsilon_{k'}^2}} g(E_k) \quad (2.28)$$

donde  $g(E_k)$  se puede expresar como

$$1 - 2f(E_k) \equiv \tanh(E_k/2k_B T). \quad (2.29)$$

Y entonces la ecuación de la brecha para toda temperatura  $T$  estará dada como

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\Delta_{k'}^2 + \varepsilon_{k'}^2}} \tanh(E_{k'}/2k_B T) \quad (2.30)$$

usando la interacción del modelo BCS y transformando la sumatoria en una integral sobre la energía se obtiene

$$1 = v_0 N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2}} \tanh(\sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2}/2k_B T). \quad (2.31)$$

Note que el integrando de la ecuación (2.31) siempre es menor que 1 conforme  $T$  aumenta, por lo que la integral mantendrá su valor constante sólo si  $\Delta$  decrece. Poniendo en evidencia que en el estado superconductor ocurre un efecto cooperativo de decrecimiento del parámetro de energía de la brecha cuando aumenta la temperatura, llevando a la desaparición de la energía de la brecha y la transición al estado normal. De esta misma ecuación vemos que la energía de la brecha desaparece a la temperatura crítica  $T_c$ , la cual se determina implícitamente por la ecuación

$$1 = v_0 N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \tanh(\varepsilon/2k_B T_c) d\varepsilon = v_0 N(0) \int_0^{\hbar\omega_D/2k_B T_c} \frac{d\xi}{\xi} \tanh(\xi) d\xi \quad (2.32)$$

cuya solución es (la obtención de la solución puede consultarse en el Apéndice C)

$$k_B T_c \simeq (2e^\gamma \hbar\omega_D/\pi) \exp[-1/v_0 N(0)]. \quad (2.33)$$

El comportamiento de  $\Delta(T)$  como función de  $T$  se obtiene por integración numérica de la ecuación (2.31), cuya gráfica se muestra en la figura 2.1. En particular para  $T \leq T_c$  ( $T \simeq T_c$ ), la expresión de  $\Delta(T)$  está dada por la ecuación (2.34) (su deducción detallada puede consultarla en el Apéndice D).

$$\Delta(T) \simeq 3.1k_B T_c \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2}. \quad (2.34)$$

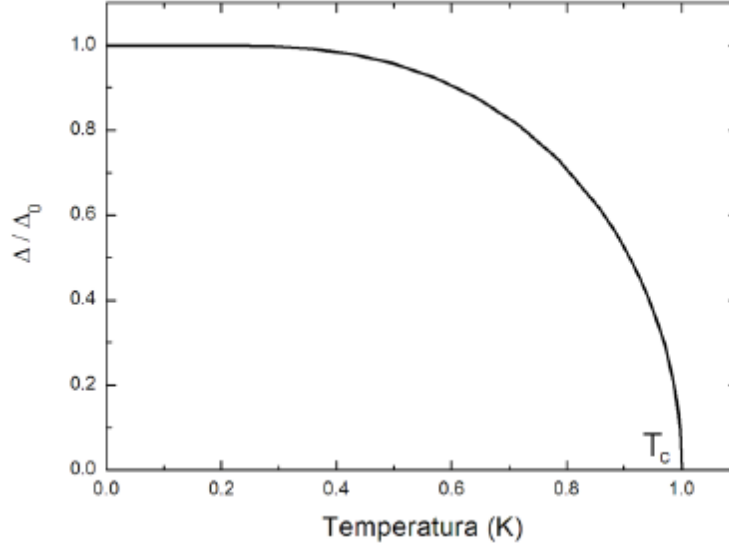


Figura 2.1 Evolución de la brecha con la temperatura dada por la teoría BCS.  
[Figura tomada de la referencia 26].

## 2.4 Formalismo Generalizado BEC (GBEC)

El formalismo GBEC está descrito en detalle en las referencias [3-5] y [27]. Este formalismo es el resultado de la extensión del modelo BEC BF en 3D de Friedberg y Lee [28, 29] aplicado a cupratos superconductores, el cual es completo solamente en el sentido en que los CP's 2h no son ignorados, además de considerar que los hoyos que conforman los CP's (2h) del mar de Fermi están asociados con los  $N$  electrones del sistema en el modelo de una banda. Este modelo tiene la ventaja de que nos permite recobrar casi otras teorías (la teoría BCS como caso un especial). Además, de que la teoría GBEC puede particularizarse a las teorías estadísticas conocidas para superconductores, incluyendo el esquema *crossover* BCS en las cuatro versiones. No obstante, una limitante del esquema de una banda, donde las masas efectivas de un electrón y un hoyo son consideradas iguales, es que no es realista en la descripción del comportamiento electrónico de los materiales como lo hace la teoría multibanda (digamos, una banda de valencia para hoyos y una banda de conducción para electrones) donde estas dos masas efectivas pueden diferir.

El formalismo GBEC está definido por un Hamiltoniano  $H = H_0 + H_{in}$ , que en esencia es un modelo estadístico completo BF de una banda que admite una desviación de la simetría [4] perfecta del número de CP's 2e y 2h en el condensado, mientras que en la teoría BCS la simetría del número de CP's en el condensado es una restricción. En tanto el término  $H_0$  del Hamiltoniano describe un gas ternario libre, gas no interactuante compuesto de electrones desapareados, CP's-2e y CP's-2h. El término  $H_{in}$  es el Hamiltoniano de interacción que describe la formación y desintegración de los CP's, de y hacia electrones y hoyos desapareados, respectivamente; el cual además es simplificado cuando se ignoran los términos con  $\mathbf{K} \neq 0$ . El impacto práctico de GBEC es que produce [5, 27] mayores  $T_c$ 's que las de BCS, sin abandonar la dinámica fonón-electrón, cuando se desvía de la simetría perfecta 50/50 de CP's

$2e/2h$  en el condensado. El Hamiltoniano  $H$  para GBEC es construido en términos de los operadores  $a_{k_1, s_1}^+$  ( $a_{k_1, s_1}$ ) de creación (aniquilación) para fermiones y en forma similar  $b_K^+$  ( $b_K$ ) y  $c_K^+$  ( $c_K$ ) para CP's-bosones  $2e$  y  $2h$ , respectivamente [30], donde los operadores  $b$  y  $c$  dependen de  $K$  y satisfacen las relaciones de conmutación pseudobosón y de anticonmutación pseudofermión [7].

Por otro lado, el gran potencial termodinámico  $\Omega(T, L^d, \mu, N_0, M_0)$  [30, 31] correspondiente al Hamiltoniano total exactamente diagonalizado para cualquier acoplamiento, siguiendo la receta prescrita por Bogoliubov [32], que junto con la energía libre de Helmholtz son utilizados para garantizar tanto la conservación de la carga como el equilibrio termodinámico del sistema. Esto es, minimizando  $F$  con respecto a  $N_0$  y  $M_0$  (número de CP's- $2e$  y CP's- $2h$  con CMM cero, respectivamente), fijando el número  $N$  total de electrones e introduciendo en forma usual el potencial químico  $\mu$ :

$$\partial\Omega/\partial\mu = -N \quad \partial F/\partial N_0 = 0 \quad \text{y} \quad \partial F/\partial M_0 = 0 \quad (2.35)$$

donde  $\partial\Omega/\partial\mu = -N$  nos asegura que la cantidad de carga del sistema se conserva y la segunda parte de la ecuación (2.35) el estado de equilibrio termodinámico del sistema con un volumen  $L^d$  a temperatura  $T$ . Evidentemente  $N$  incluye electrones desapareados y CP's  $2e$ . Con algo de álgebra, la ecuación (2.35) nos lleva a tres integrales acopladas, dos ecuaciones de tipo brecha [30]

$$[2E_f + \delta\varepsilon - 2\mu(T)] = \frac{1}{2}f^2 \int_{E_f}^{E_f + \delta\varepsilon} d\epsilon N(\epsilon) \frac{\tanh \frac{1}{2}\beta\sqrt{[\epsilon - \mu(T)]^2 + f^2 n_0(T)}}{\sqrt{[\epsilon - \mu(T)]^2 + f^2 n_0(T)}} \quad (2.36)$$

$$[2\mu(T) - 2E_f + \delta\varepsilon] = \frac{1}{2}f^2 \int_{E_f - \delta\varepsilon}^{E_f} d\epsilon N(\epsilon) \frac{\tanh \frac{1}{2}\beta\sqrt{[\epsilon - \mu(T)]^2 + f^2 m_0(T)}}{\sqrt{[\epsilon - \mu(T)]^2 + f^2 m_0(T)}} \quad (2.37)$$

y una ecuación de número que garantiza la conservación de la carga [30]

$$2n_B(T) - 2m_B(T) + n_f(T) = n \quad (2.38)$$

donde

$$n_f(T) \equiv \int_0^{\infty} d\epsilon N(\epsilon) \left[ 1 - \frac{\epsilon - \mu}{E(\epsilon)} \tanh \frac{1}{2}\beta E(\epsilon) \right] \quad (2.39)$$

es el número de electrones desapareados. De la ecuación (2.38)  $n \equiv N/L^d$  es el número de densidad de electrones, en tanto  $n_B(T)$  y  $m_B(T)$  son respectivamente los números de densidades de Cp's  $2e$  y  $2h$  en todos los estados bosónicos,  $K \geq 0$ . Donde  $n_B(T)$  es [30]

$$n_B(T) \equiv n_0(T) + n_{B+}(T) \quad (2.40)$$

$$n_{B+}(T) \equiv \int_{0^+}^{\infty} d\varepsilon M(\varepsilon) [\exp\beta(E_+(0) + \varepsilon - 2\mu) - 1]^{-1}$$

y en forma similar, para  $m_B(T)$  se tiene

$$m_B(T) \equiv m_0(T) + m_{b+}(T) \quad (2.41)$$

$$m_{B+}(T) \equiv \int_{0^+}^{\infty} d\varepsilon M(\varepsilon) [\exp\beta(2\mu - E_-(0) + \varepsilon) - 1]^{-1}.$$

Note que podemos interpretar a  $m_{B+}(T)$  precisamente como el número de CP's-2h "preformados" con  $K > 0$ , y  $n_{B+}(T)$  de CP's-2e "preformados". Estos CP's son no condensados en contraste con los CP's en el estado  $K = 0$ , los cuales ya están condensados o han tenido una BEC.

La solución autoconsistente de las tres integrales acopladas, ecs. (2.36), (2.37) y (2.38) nos proporcionan las tres variables termodinámicas del formalismo GBEC

$$n_0(T, n, \mu) \quad m_0(T, n, \mu) \quad \text{y} \quad \mu(T, n). \quad (2.42)$$

## 2.5 Energía de Condensación en GBEC de un Material Superconductor a $T = 0$

La energía de condensación a  $T = 0$  por unidad de volumen, dentro del formalismo GBEC está dada como

$$\frac{E_s - E_n}{L^d} = \frac{\Omega_s(T = 0) - \Omega_n(T = 0)}{L^d} \quad (2.43)$$

donde  $E_n$  y  $E_s$  son las energías internas para las fases en el estado normal y superconductor, respectivamente. Ya que para cualquier temperatura  $T$  la energía libre de Helmholtz se define como  $F \equiv E - TS = \Omega + \mu N$ , donde  $S$  es la entropía y  $\mu$  que en este caso es el mismo tanto para la fase en el estado superconductor (s) como para la fase en el estado normal (n). Dado que en la fase normal  $n_0(T) = 0$  y  $m_0(T) = 0$ , tal que  $\Delta(T) = 0$  para toda  $T \geq 0$ , entonces la ecuación (10) de [30] se reduce a

$$\frac{\Omega_n(T = 0)}{L^d} = \int_0^{\infty} d\varepsilon N(\varepsilon)(\varepsilon - \mu - |\varepsilon - \mu|) = 2 \int_0^{\mu} d\varepsilon N(\varepsilon)(\varepsilon - \mu) = 2 \int_{-\mu}^0 d\xi N(\xi)\xi. \quad (2.44)$$

Para la fase superconductor dentro del esquema *crossover* B [30]

$$\frac{\Omega_s(T = 0)}{L^d} = 2\hbar\omega_D n_0(0) + \int_{-\mu}^{\infty} d\xi N(\xi) \left( \xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2} \right) \quad (2.45)$$

$$= 2\hbar\omega_D n_0(0) + 2 \int_{-\mu}^{-\hbar\omega_D} d\xi N(\xi)\xi - 2 \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi N(\xi)\sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2}.$$

Substrayendo (2.44) a (2.45), y colocando  $N(\xi) \cong N(0)$  se obtiene exactamente [30]

$$\frac{E_s - E_n}{L^d} = 2\hbar\omega_D n_0(0) + N(0) \left[ (\hbar\omega_D)^2 - (\hbar\omega_D) \sqrt{(\hbar\omega_D)^2 + \Delta_0^2} + \Delta_0^2 \ln \frac{\Delta}{\hbar\omega_D + \sqrt{(\hbar\omega_D)^2 + \Delta_0^2}} \right] \quad (GBEC) \quad (2.46)$$

Una práctica común en las teorías de SC's y SF's consiste en ignorar los CP's-2e o los CP's-2h, lo que da las versiones crossover C y D. Ignorando los CP's-2h y considerando (10) de [30] para  $T = 0$ , tal que  $f_- = 0$ ,  $m_0(0) = 0$  y  $n_0(0) = \Delta_0^2/f^2$  obtenemos

$$\left[ \frac{\Omega_s(T=0)}{L^d} \right]_+ = \hbar\omega_D n_0(0) + 2 \int_{-\mu}^0 d\xi N(\xi)\xi + N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \left( \xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2} \right). \quad (2.47)$$

Substrayendo (2.44) a (2.47) se obtiene

$$\left[ \frac{E_s - E_n}{L^d} \right]_+ = \hbar\omega_D n_0(0) + N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \left( \xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2} \right) \quad (2.48)$$

lo cual nos da justo la mitad del resultado de la teoría GBEC (2.46). En forma análoga, si  $[(E_s - E_n)/L^d]_-$  es la contribución solamente de los CP's-2h, podemos suponer que  $f_+ = 0$  y  $n_0(0) = 0$  y eventualmente arribamos precisamente al lado derecho de (2.48). Pero con  $m_0(0) = \Delta_0^2/f^2$  en lugar de  $n_0(0) = \Delta_0^2/f^2$ . Entonces

$$\begin{aligned} \left[ \frac{E_s - E_n}{L^d} \right]_+ &= \left[ \frac{E_s - E_n}{L^d} \right]_- = \frac{1}{2} N(0) (\hbar\omega_D)^2 \left[ 1 - \sqrt{1 + (\Delta_0/\hbar\omega_D)^2} \right] \\ &\xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} -\frac{1}{4} N(0) \Delta_0^2 \left[ 1 - \frac{1}{4} (\Delta_0/\hbar\omega_D)^2 + \vartheta(\Delta_0/\hbar\omega_D)^4 \right] \end{aligned} \quad (2.49)$$

lo cual es nuevamente un medio de la energía de condensación de la teoría GBEC (2.46). Esta semidiferencia ocurre precisamente porque tanto  $n_0$  o  $m_0$ , y  $f_+(\epsilon)$  o  $f_-(\epsilon)$  se han suprimido.

Como ya se mencionó, una de las características prácticas del formalismo GBEC es la unificación de las diversas teorías estadísticas continuas conocidas de superconductores. Un ejemplo práctico de esto y que confirma su validez, es el caso en el que se ignoran por completo los CP's-2h para obtener el modelo tipo BEC de superconductores de T.D. Lee et al. [33]. Si además en el modelo de Lee “apagamos” la interacción bosón-fermión surge el modelo bosón-fermión ideal con el cual ya se predijeron [34][35][36] valores realistas de  $T_c$  en 2D para los cupratos.

## CAPÍTULO 3

### Energía Libre de Helmholtz del Estado Superconductor vs Normal Dentro de Formalismo GBEC

#### 3.1 Comparación de la Energía Libre de Helmholtz del Estado Superconductor con la Correspondiente al Estado Normal

A partir del gran potencial termodinámico  $\Omega$  asociado al Hamiltoniano característico del formalismo GBEC, ecuación (10) de la referencia [30], se puede definir en forma explícita la energía libre de Helmholtz como  $F/L^d \equiv \Omega/L^d + \mu N/L^d$ , denotando con  $F_s(T)$  la energía libre para la fase en el estado superconductor y con  $F_n(T)$  la correspondiente a la fase normal para temperaturas  $T \geq 0$ . En esta sección se demostrará que dentro del formalismo GBEC, para el caso especial de simetría perfecta en el número de CP's  $2e/2h$  (caso BCS), que las energías libres satisfacen la desigualdad  $F_s(T) \leq F_n(T)$  para toda temperatura  $T \in [0, T_c]$ . Un ejemplo de esto, son los resultados experimentales de las energías libres  $F_n$  y  $F_s$  para una muestra de aluminio [37] que se muestran en la figura 3.1.

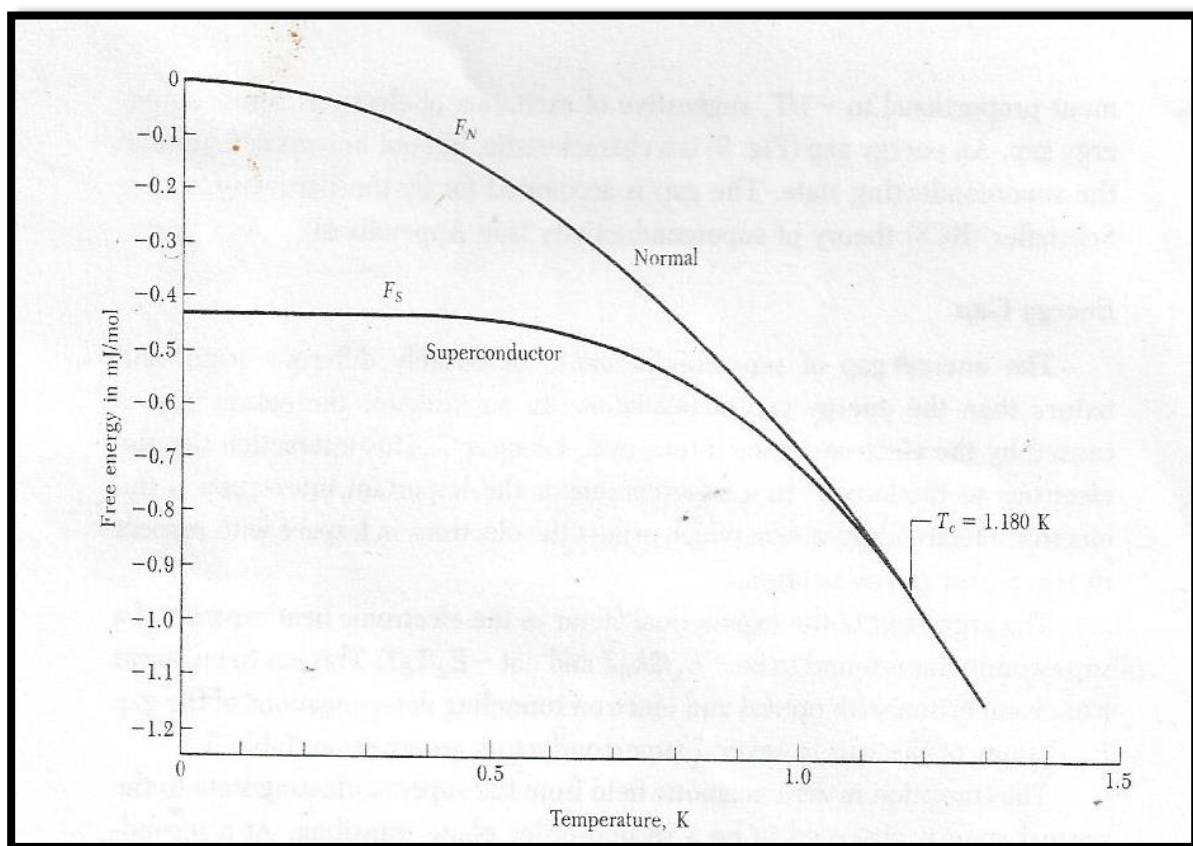


Figura 3.1 Valores experimentales de la energía libre como una función de la temperatura para el aluminio en el estado superconductor y en el estado normal. Debajo de la temperatura de transición  $T_c = 1.180$  K la energía libre es menor en el estado superconductor. La curva  $F_s$  es medida en un campo magnético nulo y  $F_n$  es medida en un campo magnético lo suficientemente intenso para poner a la muestra en el estado normal. [Figura tomada de la referencia 37].

Se puede observar de esta gráfica que la energía libre  $F_n$  es mayor o igual que la energía libre  $F_s$  dentro del intervalo de temperaturas  $0 \leq T \leq T_c$  y que para toda temperatura  $T$  tal que  $T_c \leq T$  las energías libres  $F_n$  y  $F_s$  coinciden. Además que la diferencia  $[F_s(T) - F_n(T)]/L^d$  es una función monótona decreciente de la temperatura en el intervalo  $0 \leq T \leq T_c$ .

De acuerdo con lo anterior, para especificar  $F_s$  de la fase superconductora (dentro del formalismo GBEC) se considera que  $n_0(T) = m_0(T)$  y  $n_B(T) = m_B(T)$ , lo que implica por una parte de las ecuaciones (2.40) y (2.41) que  $\mu = E_f$ . Y a su vez, que de las ecuaciones (2.38) y (2.39) las cantidades  $E_f$  y  $E_F$  coinciden, pues al tomar la simetría perfecta de CP's  $2e/2h$  se cumple que  $n = n_f$ .

Por otro lado, para especificar la energía libre de Helmholtz para la fase normal  $F_n$  se considera  $n_0(T) = m_0(T) = 0$  y que  $\Delta(T) = 0$  para toda  $T \geq 0$ . De lo anterior, se tiene entonces

$$[F_s(T) - F_n(T)]/L^d = [\Omega_s - \Omega_n]/L^d = \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \left\{ 2n_0 + N(\xi) \left( (4/\beta) \ln \left[ \frac{1 + \exp(-\beta\xi)}{1 + \exp(-\beta\sqrt{\xi^2 + \Delta^2})} \right] + 2 \left[ \xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \right] \right) \right\} \equiv \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi I(\xi, T). \quad (3.1)$$

Donde  $\xi = \epsilon - \mu$  y  $\beta = 1/k_B T$ . Además se considera  $\Delta = \sqrt{n_0(T)f_+(\epsilon)} + \sqrt{m_0(T)f_-(\epsilon)}$ , con  $f_{\pm}(\epsilon)$  como el parámetro de acoplamiento bosón-fermión de los CP's  $2e$  y  $2h$ , los cuales se suponen iguales en magnitud [esto es  $f_+(\epsilon) = f_-(\epsilon) = f$ ] y que  $f_+(\epsilon)f_-(\epsilon) = 0$ . Mientras que la densidad de estados se considera  $N(\xi) \cong N(E_F) \equiv N(0)$ , lo que también es una buena aproximación cuando  $\hbar\omega_D \ll \mu$ .

Para demostrar que el valor obtenido de la ecuación (3.1) es negativo o cero en el intervalo de la temperatura  $T \in [0, T_c]$  se hacen las siguientes observaciones:

- $I(\xi, T)$ , es una función diferenciable y continua en  $\xi$ .
- Note que el valor de  $I(\xi, T)$  se anula para  $T = T_c$ , lo que implica que la integral (3.1) es cero. De esto se deduce, que la energía libre de Helmholtz para la fase en el estado superconductor y la correspondiente a la fase en el estado normal coinciden a esta temperatura.
- Para  $T = 0$ , el valor de la integral de la ecuación (3.1) [30] resulta ser

$$[F_s(0) - F_n(0)]/L^d = N(0)(\hbar\omega_D)^2 \left[ 1 - \sqrt{1 + (\Delta_0/\hbar\omega_D)^2} \right] < 0. \quad (3.2)$$

La energía de la ecuación (3.2) está asociada con el valor esperado de la función de onda de prueba BCS, la cual nos proporciona una rigurosa cota superior al valor exacto de la energía para el estado fundamental del Hamiltoniano BCS. En la referencia [38] se hace una estimación para la energía de condensación del niobio (Nb, bcc,  $T_c \simeq 9.3K$ , campo magnético crítico  $H_c \simeq 160kA/m$ ) la cual resulta ser  $2 \times 10^{-6} eV/\text{átomo}$ ; las energías de condensación son tan pequeñas que fueron un misterio hasta que la teoría BCS demostró que son del orden de  $(k_B T_c)^2 N(0) = 807.8 J/m^3$ , con  $N(0) = 4.904 \times 10^{46} (Jm^3)^{-1}$ . Cantidad que puede ser comparada con la energía de condensación



de  $1414.4 J/m^3$  dada por la ecuación (3.2), en la que se consideraron los valores de  $\Delta_0 = 2.403 \times 10^{-22} J$  y de  $T_D = 275 K$  [39].

Por otro lado, para el caso del aluminio se consideran los valores:  $\Delta_0 = 2.804 \times 10^{-23} J$ ,  $T_D = 428 K$ ,  $T_c = 1.18 K$  y  $N(0) = 1.016 \times 10^{47} (Jm^3)^{-1}$  [39]; que al sustituirse en la ecuación (3.2) nos da la energía de condensación de  $-39.93 J/m^3 = -0.399 mJ/mol$ , resultado que puede compararse con la energía de condensación de  $-0.43 mJ/mol$  que se obtiene directamente de la gráfica en la figura 3.1.

d) Evaluando la integral de la ecuación (3.1) se obtiene

$$\begin{aligned}
[F_s(T) - F_n(T)]/L^d &= 2\hbar\omega_D n_0(T) [1 - (1/2)VN(0)\text{senh}^{-1}(\hbar\omega_D/\Delta)] + \\
N(0)(\hbar\omega_D)^2 [1 - \sqrt{1 + (\Delta/\hbar\omega_D)^2}] - \hbar\omega_D VN(0)n_0(T)\text{senh}^{-1}(\hbar\omega_D/\Delta) + & \quad (3.3) \\
4k_B T \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi N(\xi) \ln \left\{ \frac{1 + \exp(-\beta\xi)}{1 + \exp(-\beta\sqrt{\xi^2 + \Delta^2})} \right\} &< 0
\end{aligned}$$

donde  $V = f^2/2\hbar\omega_D$  puede identificarse como la intensidad de la interacción atractiva entre fermiones en el modelo de interacción BCS. Note que el resultado de la suma de los dos últimos términos de la ecuación (3.3) es negativo, debido a que el valor (de la integral) del último término tiene una cota superior igual a  $4N(0)k_B T(\hbar\omega_D)\ln 2$ .

De las observaciones anteriores se puede concluir que: a)  $[F_s(T) - F_n(T)]/L^d \leq 0$  en el intervalo de temperaturas  $0 \leq T \leq T_c$ , y b) que nuestros resultados justifican apropiadamente, en forma cualitativa, la posición y diferencia entre las gráficas para  $F_n$  y  $F_s$  de la figura 3.1.

Por último, es posible una demostración más general para el resultado de la ecuación (3.3) si se muestra que  $I(\xi, T)$  es una función estrictamente creciente de  $T$  en el intervalo de temperaturas  $0 < T < T_c$  y para toda  $\xi > 0$ , para lo cual se calcula

$$\begin{aligned}
\frac{\partial I(\xi, T)}{\partial T} &= -2(dn_0/dT) \left( \frac{f^2 N(\xi)}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} - 1 \right) \\
+N(\xi) \left\{ 4k_B \ln \left[ \frac{1 + \exp(-\beta\xi)}{1 + \exp(-\beta\sqrt{\xi^2 + \Delta^2})} \right] + (4/\beta) \frac{\partial}{\partial T} \ln \left[ \frac{1 + \exp(-\beta\xi)}{1 + \exp(-\beta\sqrt{\xi^2 + \Delta^2})} \right] \right\} &= \\
2n'_0(T) - \left( \frac{2\hbar\omega_D}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} N(\xi) V n'_0(T) \right) \left( 1 - 2 \left[ \frac{\exp\{-\beta\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}\}}{1 + \exp\{-\beta\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}\}} \right] \right) + 4k_B N(\xi) \ln \left\{ \frac{1 + \exp\{-\beta\xi\}}{1 + \exp\{-\beta\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}\}} \right\} & \quad (3.4)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +4k_B N(\xi) \left\{ \frac{\beta \xi \exp\{-\beta \xi\}}{1 + \exp\{-\beta \xi\}} - \frac{\beta \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \exp\{-\beta \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}\}}{1 + \exp\{-\beta \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}\}} \right\} \gtrsim \\
& - \frac{2\hbar\omega_D}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} N(\xi) V n'_0(T) \left\{ 1 - 2 \frac{\exp\{-\beta \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}\}}{1 + \exp\{-\beta \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}\}} \right\} + N(\xi) \Delta / 2T > 0.
\end{aligned}$$

Dado que el valor de  $I(\xi, T)$  se anula a la temperatura  $T = T_c$  se tiene que  $I(\xi, T) \leq 0$  en el intervalo de temperaturas  $0 < T \leq T_c$ . Por lo tanto, se puede afirmar que el valor de la integral de la ecuación (3.1) será menor o igual a cero para toda temperatura  $T$  tal que  $0 \leq T \leq T_c$ , lo que a su vez implica que en este intervalo de temperaturas la energía libre de Helmholtz asociada a la fase en el estado normal es mayor o igual a la energía libre correspondiente a la fase en el estado superconductor.

## CONCLUSIONES

El ingrediente básico dentro del marco teórico de la superconductividad es el mecanismo dinámico de apareamiento entre fermiones que intercambian algún tipo de pseudobosón (fonón, plasmón, etc.), proceso mediante el cual vencen su repulsión eléctrica. Desde otra perspectiva, en la búsqueda del modelo adecuado para mimetizar la interacción atractiva entre partículas fermiónicas para la formación de pares de Cooper (pares de electrones u hoyos) en sistemas de muchos fermiones en la materia condensada, se encuentra que para un sistema 1D superconductor es adecuado el uso de un pozo de potencial delta; en tanto para sistemas superconductores 2D y 3D se considera que la formación de CP's es debido al acoplamiento de los fermiones mediante su interacción vía un pozo de potencial delta regularizado que nos proveen de uno y sólo un estado ligado de energía. El valor de la energía correspondiente al estado ligado en el caso 2D se da en la ecuación (B8) y para el caso 3D se da en la ecuación (B13).

Un ejemplo del uso de un pozo de potencial delta 2D regularizado es su aplicación en el estudio de la superfluidez del sistema que consiste de una monocapa diluída de  $^3\text{He}$  sobre una película delgada de  $^4\text{He}$  II, en el cual se ha utilizado este tipo de pozos de potencial (no mencionado por Miyake) para imitar la interacción atractiva entre las partículas  $^3\text{He}$  de la monocapa diluída. Lo que se hace evidente en la forma propuesta para la expresión de la energía del estado ligado  $E_0$  en el vacío, y que posteriormente permite deducir analíticamente las ecuaciones de Miyake del sistema,  $\mu$  y  $\Delta$  explícitamente en términos de  $E_F$  y  $E_0$ .

En el contexto de la teoría BCS de la superconductividad, se considera a los CP's como bosones conformados por electrones (u hoyos) acoplados debido a su interacción con la red cristalina. El acoplamiento es visto como el intercambio de fonones (cuantos de energía vibracional de la red) entre los electrones de conducción. Si tal modelo es complementado con una relación lineal de dispersión de los CP's, que incluya la posibilidad del rompimiento de pares, esto implica tanto la obtención de temperaturas substancialmente mayores que las dadas por la teoría BCS como la posibilidad de una condensación Bose-Einstein (BEC) para sistemas de dimensión mayor a la unidad. Resultado que contrasta con el obtenido cuando se consideran bosones de masa  $m$  en el vacío con una relación cuadrática de dispersión, lo que condiciona una BEC para un sistema de dimensión  $d > 2$ .

Más aún, al considerar una mezcla ideal de fermiones desapareados y pares rompibles con una relación lineal de dispersión, para la cual el rompimiento-térmico del par está explícitamente permitido (modelo simple ideal bosón-fermión), se obtiene el resultado dado en la ecuación (1.23) para la temperatura crítica. Resultado que contrasta con el valor de la temperatura infinita  $T_c$  dada en la ecuación (1.17) para un gas puro de pares rompibles, observándose que la simple presencia tanto de CP's "preformados" como de fermiones desapareados en el estado fundamental ha conducido a  $T_c$ 's de valor finito.

El formalismo GBEC es completo en el sentido en que los CP's 2h no son ignorados, donde los hoyos que conforman los CP's (2h) del mar de Fermi están asociados con los  $N$  electrones del sistema en el modelo de una banda, y que también experimentan una BEC sólo aquellos CP's-2h ( $2e$ ) con  $\text{CMM} \neq 0$  ( $K > 0$ ). Este modelo tiene la ventaja de que nos permite recobrar casi otras teorías, la teoría BCS como caso un especial. Además, que la teoría GBEC puede particularizarse a las teorías estadísticas conocidas para superconductores, incluyendo el esquema *crossover* BCS-Bose en las cuatro versiones. El impacto práctico de GBEC es que produce  $T_c$ 's mayores que las predichas en la teoría

BCS, sin abandonar la dinámica electrón-fonón, cuando uno se desvía de la simetría perfecta 50/50 de CP's  $2e/2h$  en el condensado.

En base al formalismo GBEC, es posible demostrar un resultado fundamental relacionado con las fases presentes en un material superconductor en el intervalo de temperaturas  $0 \leq T \leq T_c$ : la energía libre de Helmholtz asociada al estado superconductor es menor o igual a la energía libre del estado normal en el intervalo de temperaturas  $0 \leq T \leq T_c$ . Lo que significa que la fase en el estado normal es menos estable que la fase en el estado superconductor, por lo que el sistema fermiónico en el intervalo de temperaturas considerado tiende a tomar el estado superconductor mediante su apareamiento para la formación de CP's, donde la intensidad de este proceso a una temperatura  $T$  depende de la diferencia de las energías libres de Helmholtz del estado normal y superconductor.

## APÉNDICE A Pozos de Potencial Delta en $d = 1, 2$ y $3$ Dimensiones

El objetivo de esta sección es la discusión del modelo adecuado de interacción entre partículas fermiónicas para la formación de CP's (pares de electrones u hoyos) en sistemas de muchos fermiones en la materia condensada. Debido a que el fenómeno de la superconductividad en sistemas casi-bidimensionales o 3D es un tipo de condensado Bose-Einstein de CP's, cuando dicho sistema se enfría por debajo de la temperatura crítica de transición  $T_c$ , será importante y fundamental desarrollar un modelo que explique y justifique la formación de tal tipo de bosones.

Para hacer más comprensible la formación de CP's, se considera que la interacción atractiva entre el par fermiónico que supera su fuerza repulsiva entre el par de electrones (o huecos) que componen el CP, es el resultado de la emisión de un fonón por un electrón y la absorción del mismo por el otro electrón, mecanismo que simplifica y caracteriza la interacción del par fermiónico con la red. Por otro lado, otro modelo que mimetiza la formación de un CP es aquel que considera que la formación de CP's es debido al acoplamiento de pares de electrones (u hoyos) mediante un pozo de potencial delta regularizado. Pozo de potencial delta para sistemas  $d = 1$  y pozos de potencial delta regularizados para sistemas  $d = 2$  y  $d = 3$  [40, 41].

La secuencia de este Apéndice será la siguiente: primero se muestra que para sistemas de dimensión  $d = 1$  el uso de pozos de potencial delta es suficiente, pues soporta un sólo nivel de energía correspondiente a un estado ligado. Y finalmente se muestra que los pozos de potencial delta en  $d = 2$  y  $d = 3$  tienen un número infinito de niveles de energía para el estado ligado, pero que posteriormente sujetos al método de regularización (Apéndice B) soportan solamente un nivel de energía que corresponde al estado ligado del par fermiónico. Lo que es conveniente en aquel tipo de interacciones que dependen de un sólo parámetro y que facilitan el modelado de la dinámica para la formación de CP's en superconductores casi-bidimensionales (como cupratos) o en  $d = 3$  para superconductores convencionales y en superfluidos fermiónicos neutros como los gases ultrafríos atrapados de Fermi [42].

### A.1 Pozo de Potencial Delta 1D

Considere el potencial atractivo delta  $\delta(x)$  de la forma

$$V(x) = -v_0\delta(x) \tag{A1}$$

donde  $\delta(x)$  tiene dimensiones del recíproco de la longitud, dado que  $\int \delta(x)dx = 1$  asegurando que el intervalo de integración incluye el origen, y  $v_0 \geq 0$  [40, 43] con dimensiones de energía-longitud. Para estados ligados ( $E < 0$ ), la ecuación de Schrödinger para una partícula de masa  $m$  en un pozo de potencial  $V(x)$  tiene la forma

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2} - k^2u(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}v_0\delta(x)u(x) \tag{A2}$$

donde  $u(x)$  es la función de onda y  $k^2 = 2m|E|/\hbar^2$ . Como la solución de la ecuación (A2) para toda  $x \neq 0$  debe desaparecer cuando  $x \rightarrow \pm\infty$ , por inspección es evidente que  $u(x) = \exp(-kx)$  para  $x > 0$  y  $u = \exp(kx)$  para  $x < 0$ . Integrando la ecuación (A2), en cuyo resultado sustituyen  $u(x)$  y se aplican

las condiciones de frontera (en torno a  $x = 0$ ), se encuentra que para el pozo de potencial delta 1D la energía correspondiente del único estado ligado está dada como

$$E = -\frac{mv_0^2}{2\hbar^2}. \quad (A3)$$

## A.2 Pozo de Potencial Delta en $d$ -dimensiones

En  $d$ -dimensiones, el pozo de potencial delta atractivo puede ser construido a partir de un pozo de potencial atractivo [42] de “ancho” y profundidad finita

$$V(\mathbf{r}) \equiv -V_0\theta(R - r) \quad (A4)$$

donde  $\mathbf{r}$  es un vector  $d$ -dimensional y  $r$  su longitud, en tanto que  $\theta(x) = (1/2)[1 + \text{sgn}(x)]$  es la función escalón de Heaviside, la cual toma el valor de 1 para  $x > 0$  y 0 para  $x \leq 0$ ,  $R$  es el ancho (o radio) del pozo y  $V_0 \geq 0$  su profundidad. Así, el pozo de potencial delta atractivo se obtiene de (A4) mediante el límite doble

$$-V_0\theta(R - r) \xrightarrow[\exists R^d V_0 = \text{cte}]{V_0 \rightarrow \infty, R \rightarrow 0} -v_0\delta(\mathbf{r}) \quad (A5)$$

donde  $v_0 \equiv C_d R^d V_0 \geq 0$  y  $C_d \equiv \pi^{d/2}/\Gamma(d/2 + 1)$ . Nótese que  $C_2 = \pi$  y  $C_3 = (4/3)\pi$ . El valor de  $v_0$  se determina explícitamente después de integrar ambos lados de la ecuación (A5) sobre todo el volumen  $d$ -dimensional.

## A.3 Pozo de Potencial Delta 2D

Para el caso de un pozo de potencial delta en 2D, construido a partir de un pozo de potencial de alcance  $R$  dado por (A4) y asegurando que  $\int d^2\mathbf{r}\delta(\mathbf{r}) = 1$  se requiere que

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty, R \rightarrow 0} V_0 \pi R^2 \equiv v_0 < \infty. \quad (A6)$$

Considerando la ecuación de Schrödinger para el caso  $E < 0$  y un pozo de potencial atractivo (A4) en 2D

$$\nabla^2\psi(\mathbf{r}) - \frac{2m}{\hbar^2}[V(\mathbf{r}) + |E|]\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (A7)$$

se propone una solución separable en términos de las variables  $r$  y  $\phi$  de la forma  $\psi(\mathbf{r}) = f(r)\exp(i\nu\phi)$ , que al sustituirse en la ecuación (A7) será válida para  $\nu = 0, 1, 2, 3, \dots$ ; con la variable angular  $\phi$  en el intervalo  $-\pi \leq \phi < \pi$ .

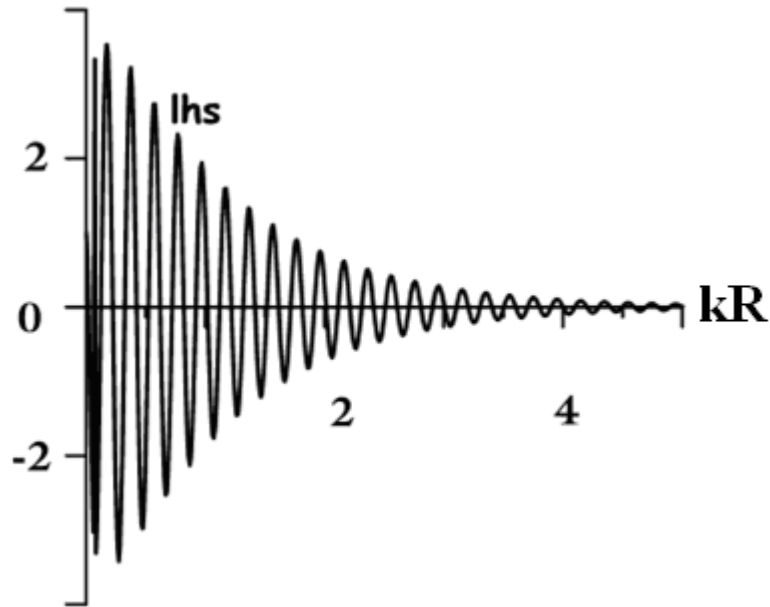
En el intervalo  $0 \leq r \leq R$  las soluciones radiales finitas en  $r = 0$  son las funciones cilíndricas de Bessel  $J_\nu(Kr) \equiv \sqrt{2Kr/\pi}j_{\nu-1/2}(Kr)$  de orden  $\nu$  con  $K^2 \equiv 2m(V_0 - |E|)/\hbar^2$ . Y para  $r > R$ , las soluciones linealmente independientes son las funciones modificadas de Bessel  $K_\nu(kr)$ , donde  $k =$

$2m|E|/\hbar^2$ , las cuales son regulares conforme  $r \rightarrow \infty$ . Las condiciones de frontera en  $r = R$  pueden ser escritas como

$$\frac{dJ_\nu(Kr)/dr}{J_\nu(Kr)} \Big|_{r=R^-} = \frac{dK_\nu(kr)/dr}{K_\nu(kr)} \Big|_{r=R^+}. \quad (A8)$$

Puesto que lo que se quiere confirmar es el colapso de los niveles energéticos para un potencial delta de interacción entre pares de cuerpos de un sistema de un número grande de cuerpos, es suficiente mostrar esto para el menor nivel de estado ligado,  $\nu = 0$  en la ecuación (A8). Para el cual [44]

$$KR \frac{J_1(KR)}{J_0(KR)} = kR \frac{K_1(kR)}{K_0(kR)}. \quad (A9)$$



**Figura A1.** Los estados ligados para un pozo delta 2D están asociados con los ceros de (A11). Para  $V_0/|E|=1000$ , esta gráfica ilustra las raíces (estados ligados) de (A11), las cuales forman un conjunto infinito conforme nos aproximamos al pozo límite  $\delta$  [Figura tomada de la referencia 42].

En la referencia [42] se hace un análisis detallado de (A9) que nos permite cuantificar el número de estados ligados, llegándose a la conclusión que para el pozo de potencial  $\delta$  atractivo el número  $n$  de estados ligados corresponde al número de ceros del lado izquierdo de (A9). Esto es, de la ecuación (A6)

$$KR = kR \left( \frac{V_0}{|E|} - 1 \right)^{1/2} \xrightarrow{V_0 \rightarrow \infty, R \rightarrow 0} \sqrt{2mV_0/\pi\hbar^2} < \infty \quad (A10)$$

resultado que no requiere necesariamente que  $KR \ll 1$  (caso de un pozo de potencial somero). Si  $KR$  no es  $\ll 1$ , las funciones de Bessel oscilan por largos argumentos sin un periodo constante. En tal caso [44, pág 364]

$$J_1(x) \xrightarrow{x \gg 1} \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{3}{4}\pi\right). \quad (A11)$$

La cual permite localizar los ceros de la parte izquierda de (A9) que son a la vez solución de (A9) en el límite  $\delta$  del pozo de potencial atractivo, note que conforme  $V_0/|E|$  crece los ceros se aproximan entre sí sobre el eje “ $kR$ ”, tal que cuando nos aproximamos al pozo límite  $\delta$  ( $V_0/|E| \rightarrow \infty$ ) el número  $n$  de estados ligados crece indefinidamente. (Como puede verse en la figura A1).

#### A.4 Pozo de Potencial Delta 3D

Para el potencial (A4) en  $d = 3$ , la función de onda de la partícula en coordenadas esféricas [45] es  $\psi(\mathbf{r}) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ , donde [46]  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  son los armónicos esféricos y  $R_l(r)$  es la parte radial de la función de onda. Para  $0 \leq r \leq R$ , las soluciones radiales finitas (o regulares) son las funciones esféricas de Bessel del primer tipo  $j_l(Kr)$  de orden  $l$ , con  $K^2 = 2m(V_0 - |E|)/\hbar^2$ , pues  $j_l(Kr) < \infty$  (regular) en  $r = 0$ . Para  $r \geq R$ , las soluciones radiales linealmente independientes son las llamadas funciones esféricas modificadas de Bessel  $\kappa_l(kr)$ , con  $k^2 = 2m|E|/\hbar^2$ , donde  $\kappa_l(kr)$  decae exponencialmente conforme  $r \rightarrow \infty$ . Las condiciones de frontera en  $r = R$ , que expresan la continuidad de la función de onda  $R_l(r)$  y su discontinuidad en la primera derivada pueden combinarse en la relación

$$\frac{dj_l(Kr)/dr}{j_l(Kr)} \Big|_{r=R^-} = \frac{d\kappa_l(kr)/dr}{\kappa_l(kr)} \Big|_{r=R^+} \quad (A12)$$

tomando  $l = 0$  y recordando [46, pág. 730] que  $j_0(x) = \text{sen}x/x$  y  $\kappa_0(x) = \exp(-x)/x$ , de la ecuación (A12) se obtiene

$$KR \cot(KR) = -kR \quad \text{con } (l = 0). \quad (A13)$$

Es posible escribir las energías del estado ligado  $l = 0$  como  $E_n = -\hbar^2/2mR^2(\pi^2/4 + \varepsilon_n^2)$ , donde  $\varepsilon_n$  son las raíces adimensionales de (A12), con  $n = 1, 2, 3, \dots$ . De la solución gráfica estándar [47] de la condición (A13) se muestra que existen  $n$  estados ligados  $l = 0$ , siempre y cuando el parámetro del pozo sea tal que [40, pág. 124]

$$\left(n - \frac{1}{2}\right)\pi \leq \left(\frac{2mV_0R^2}{\hbar^2}\right) \leq \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \quad (n = 1, 2, \dots \infty). \quad (A14)$$

El potencial delta 3D,  $-v_0\delta(\mathbf{r})$ , como se definió en (A5), tendrá una intensidad

$$v_0 = \int d^3r v_0 \delta(\mathbf{r}) = \lim_{v_0 \rightarrow \infty, R \rightarrow 0} \int d^3r V_0 \theta(R - r) = \lim_{v_0 \rightarrow \infty, R \rightarrow 0} \frac{4\pi}{3} V_0 R^3 < \infty \quad (A15)$$



por lo que conforme  $V_0 \rightarrow \infty$  y  $R \rightarrow 0$ , la parte central de (A14)

$$(2mV_0R^2/\hbar^2)^{1/2} = (3m\nu_0/2\pi\hbar^2R)^{1/2} \xrightarrow{R \rightarrow 0} \infty. \quad (A16)$$

De aquí, se infiere que el número  $n$  de estados ligados en el pozo de potencial delta 3D es infinito, para cualquier intensidad  $\nu_0$  finita y fija.

## APÉNDICE B Pozos de Potencial Delta Regularizados en $d = 2$ y 3 dimensiones

### B.1 Pozo de Potencial Delta 2D Regularizado

El proceso de regularización en  $d = 2$  o 3, consiste en producir un pozo  $\delta$  con una intensidad infinitesimalmente pequeña  $\nu_0$  a partir de un pozo de ancho y profundidad finita. La regularización de los pozos de potencial atractivos 2D será de carácter fundamental, debido a que los pozos de potencial regularizados son útiles para modelar y justificar la presencia de pares de Cooper en diversos materiales superconductores.

Primero, se considera un pozo circular de interacción entre dos cuerpos [48]

$$V_R(r) = \frac{2}{R^2(\ln|R/R_0| + \gamma)} \theta(R - r) \quad \text{donde } (R_0 > R > 0) \quad (B1)$$

que en el límite cuando  $R \rightarrow 0^+$  implica que  $V_R(r) \rightarrow -\nu_0\delta(\mathbf{r})$  con  $\nu_0 > 0$ , el cual posee sólo un estado ligado (onda  $S$ ). Es decir, obtenemos una regularización del potencial atractivo delta 2D con una intensidad que se disipa en forma logarítmica, pues  $V_R(r) \xrightarrow{R \rightarrow 0} 0$  ( $\forall r > 0$ ). Donde  $R$  sigue siendo el ancho del pozo,  $R_0$  es un parámetro arbitrario que mide la intensidad de la interacción,  $\gamma = 0.5772156 \dots$  es la constante de Euler-Mascheroni y  $\theta(R - r)$  la función escalón de Heaviside. Además, el potencial (B1) en el límite delta (A10) nos permite calcular la intensidad del pozo  $\delta$ , esto es

$$\nu_0(R) \equiv \int d^2r V_R(r) = -2\pi/(\ln|R/R_0| + \gamma) \quad (B2)$$

cuyo valor es positivo y que se disipa en forma logarítmica conforme  $R \rightarrow 0^+$ .

Cuando el valor obtenido (B2) es substituido en la ecuación de Schrödinger, en unidades  $\hbar = 2m = 1$  [48], dado que  $V_R(r)$  es un potencial regular, que puede ser tratado mediante la mecánica cuántica elemental, cuyo análisis en el límite cuando  $R \rightarrow 0$ , con  $R_0$  fijo, nos proporciona dos relaciones. Una para el parámetro arbitrario  $R_0$  y otra para el cambio de fase  $\delta_0(k)$  de la onda  $S$ , las cuales están dadas como [48]

$$\tan\delta_0(k) = \frac{\pi}{2} \ln(kR_0/2) \quad (B3)$$

y

$$E_0 = -4/R_0^2 \quad (B4)$$

con  $E = k^2$ . De (B3) y (B4), es posible notar que la dependencia con  $R$  (regulador) se ha removido, por lo que se dice que las magnitudes  $E_0$  y  $\delta_0(k)$  son renormalizadas. Además, que las unidades de  $E_0$  estarán dadas como  $[E_0] = \hbar^2/mR_0^2$ . Por otra parte, debido a que la escala  $R_0$  es arbitraria es necesario determinarla mediante una condición de normalización, procedimiento mediante el cual se establece una relación con alguna cantidad física. Y precisamente el valor de  $R_0$  es fijado cuando se identifica  $E_0$  de (B4) como la energía del único estado ligado.

O bien, en forma equivalente, siguiendo el procedimiento de la sección pozo de potencial delta-2D a partir de la ecuación (A7), donde ahora la masa se sustituye por la masa reducida de un par de electrones y el potencial de la ecuación (B1) es multiplicado por un factor  $\hbar^2/2\mu$ , hasta llegar a la ecuación (A9) para la condición de frontera. Considerando  $\nu = 0$ , se tiene que

$$KR = \sqrt{-\frac{2}{(\ln|R/R_0| + \gamma)} - \frac{2\mu}{\hbar^2}|E|R^2} \quad (B5)$$

$$kR = \sqrt{2\mu|E|R^2/\hbar^2}. \quad (B6)$$

Note que estas dos últimas cantidades son mucho menores que la unidad cuando  $R \rightarrow 0$ . Puesto que para argumentos pequeños [44, pág. 360] son válidas las aproximaciones  $J_\nu(x) \xrightarrow{x \ll 1} x^\nu/2^\nu \nu!$  Y  $xK_1(x)/K_0(x) \xrightarrow{x \ll 1} -1/\ln x$ ; la condición de frontera (A9) puede ser escrita como

$$-1/(KR)^2 = \ln(kR)/2 \quad (B7)$$

en la cual se introducen los valores de  $KR$  y  $kR$ , del resultado obtenido se toma el límite  $R \rightarrow 0$  para obtener el valor de la energía del único estado ligado

$$|E| = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\exp(2\gamma)}{R_0^2} \right]. \quad (B8)$$

Cuya unicidad puede justificarse por medio de  $n = ENT[\alpha k_{MAX}R/\pi]$ , donde  $\alpha = (|V_R|/|E| - 1)^{1/2}$  y  $n$  es el número de estados ligados para  $n \geq 2$ . Así, para un potencial delta 2D regularizado  $n$  tiene la forma

$$n = ENT[(2m/\pi^3 \hbar^3)^{1/2} \alpha v_0^{1/2}]. \quad (B9)$$

Para el cual se tiene que  $n \xrightarrow{R \rightarrow 0} 0$ , lo que quiere decir que no existen 2 o más estados ligados y que el estado ligado con energía dada por la ecuación (B8), es único.

## B.2 Pozo de Potencial Delta 3D Regularizado

Mediante un procedimiento análogo de la sección anterior, se considera el pozo de potencial esférico [48]

$$V_R(r) = -(\pi^2/4R^2 + 2/RR_0)\theta(R - r) \quad (B10)$$

que se disipa cuando  $R \rightarrow 0$ , esto es  $V_R(r) \xrightarrow{R \rightarrow 0} 0$  para toda  $r > 0$ . Además de una intensidad

$$v_0(R) = \int_{R^3} d^3r V_R(r) = \frac{\pi^3}{3}R + \frac{8\pi R^2}{3R_0} \quad (B11)$$

donde la intensidad del pozo es positiva y que tiende a cero conforme  $R \rightarrow 0$ . Por lo que esto nos provee de una regularización del potencial del potencial delta 3D. Dándonos para el cambio de fase renormalizado  $\delta_0(k)$  de la onda  $S$  el valor  $\tan\delta_0(k) = -kR_0$ ; en tanto el único estado ligado de energía que existe para  $R_0 > 0$  será  $E_0 = -1/R_0^2$ .

O bien, en forma equivalente, siguiendo el procedimiento de la sección pozo de potencial delta-3D, hasta la ecuación (A13) para la condición de frontera. La cual puede reescribirse como

$$\sqrt{\lambda - y^2}/y = -coty \quad (B12)$$

si  $y = KR$  y  $\lambda = (2\mu/\hbar^2)R^2|V_R|$ , donde  $V_R$  es el potencial de la ecuación (B10) por un factor  $\hbar^2/2\mu$ , de lo cual es posible obtener, después de un poco de álgebra y de considerar  $R \ll 1$ , la energía del único estado ligado

$$|E| = \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} + \frac{4R\hbar^2}{\mu R_0^3 \pi^2} \xrightarrow{R \rightarrow 0} \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2}. \quad (B13)$$

La justificación de que el estado ligado es único se realiza retomando la ecuación (D14) en la cual se sustituye la intensidad de acoplamiento  $v_0(R) = \pi^3 R/3 + 8\pi R^2/3R_0$ , y que después al tomar el límite cuando  $R \rightarrow 0$ , se tiene la desigualdad

$$\left(n - \frac{1}{2}\right)\pi \leq \frac{\pi}{2} < \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \quad (B14)$$

la cual se satisface solamente para  $n = 1$  y por lo tanto sólo hay un estado ligado.

## APÉNDICE C Cálculo de la integral $\int_0^{\hbar\omega_D/2k_B T_c} d\xi (\tanh\xi/\xi)$

Sea  $b = \hbar\omega_D/2k_B T_c > 1$  y definiendo

$$f(b) = \int_0^b d\xi [\tanh\xi/\xi] = \int_0^1 d\xi [\tanh\xi/\xi] + \int_1^b d\xi \left\{ \frac{1}{\xi} - \frac{2}{\xi[\exp(2\xi) + 1]} \right\} \quad (C1)$$

donde se ha usado la identidad  $\tanh x/x = (1/x)(1 - [2/\exp(2x) + 1])$ . Entonces

$$f(b) = \int_0^1 d\xi [\tanh\xi/\xi] + \ln b - \int_1^\infty d\xi \left\{ \frac{2}{\xi[\exp(2\xi) + 1]} \right\} + \int_b^\infty d\xi \left\{ \frac{2}{\xi[\exp(2\xi) + 1]} \right\} \quad (C2)$$

note que la última integral de (C2) tiende a cero para  $b$  grande. En tanto la segunda integral puede escribirse [46]

$$\int_1^\infty d\xi \left\{ \frac{2}{\xi[\exp(2\xi) + 1]} \right\} = \int_1^\infty d\xi \left\{ \frac{\operatorname{sech}(\xi)\exp(-\xi)}{\xi} \right\} = 2 \sum_{n=1}^\infty (-1)^{n+1} E_i(2n) \quad (C3)$$

para la cual se ha utilizado la identidad  $\operatorname{sech}x = 2\{\sum_{n=1}^\infty (-1)^{n+1}\exp[-(2n-1)x/x]\}$  y la definición

$$E_i(x) = \int_x^\infty dt [\exp(-t)/t]. \quad (C4)$$

La cual se expresa también como

$$E_i(x) = \int_x^\infty dt [\exp(-t)/t] = \int_0^\infty dt [\exp(-t)/t] - \int_0^x dt [\exp(-t)/t] \quad (C5)$$

que después de un poco de álgebra, se llega al resultado

$$\int_0^x dt \frac{1 - \exp(-t)}{t} = E_i(x) + \gamma + \ln x \quad (C6)$$

donde  $\gamma$  es la constante de Euler-Mascheroni.

Por otro lado, la integral

$$\int_0^1 d\xi \frac{\tanh\xi}{\xi} = \int_0^1 d\xi \frac{\operatorname{senh}\xi}{\xi} \operatorname{sech}\xi \quad (C7)$$

que se desarrolla de la siguiente manera

$$2 \int_0^1 d\xi \frac{\operatorname{senh}\xi}{\xi} \exp(-\xi) = E_i(2) + \gamma + \ln(2)$$

$$2 \int_0^1 d\xi \frac{\operatorname{senh}\xi}{\xi} \exp(-3\xi) = -E_i(2) + E_i(4) + \ln(2) \quad (C8)$$

$$2 \int_0^1 d\xi \frac{\sinh \xi}{\xi} \exp(-5\xi) = -E_i(4) + E_i(6) + \ln(3/2)$$

$$2 \int_0^1 d\xi \frac{\sinh \xi}{\xi} \exp(-7\xi) = -E_i(6) + E_i(8) + \ln(4/3)$$

⋮

De manera que

$$\int_0^1 d\xi \frac{\tanh \xi}{\xi} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} E_i(2n) + \gamma + \sum_{n=1}^{\infty} \{\ln[(2n+1)^2/(2n)(2n+2)]\} \quad (C9)$$

donde la última sumatoria, de acuerdo con los productos infinitos de Wallis, es equivalente a

$$\ln \left\{ 2 \frac{3 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 7 \cdots (2n-1)(2n-1)(2n+1)(2n+1) \cdots}{2 \cdot 2 \cdot 4 \cdot 4 \cdot 6 \cdot 6 \cdots (2n-2)(2n-2)(2n)(2n) \cdots} \right\} = \ln \left( 2 \frac{2}{\pi} \right) \quad (C10)$$

y utilizando los resultados de las ecuaciones (C2), (C3) y (C9), se obtiene el resultado [44]

$$1/\nu_0 N(0) = \int_0^{\hbar\omega_D/2k_B T_c} d\xi (\tanh \xi / \xi) = \ln \left( \frac{4e^\gamma}{\pi} \frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c} \right). \quad (C11)$$

## APÉNDICE D Ecuación de la Brecha BCS $\Delta(T)$ para $T \leq T_c$ ( $T \simeq T_c$ )

Partiendo de la ecuación [31, págs. 447-449]

$$1 = \nu_0 N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2}} \tanh \left( \frac{\sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2}}{2k_B T} \right) \quad (D1)$$

definiendo  $x \equiv \varepsilon/2k_B T$  y  $k \equiv \Delta(T)/2k_B T$ , (D1) se puede escribir

$$\frac{1}{\nu_0 N(0)} = \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T} \equiv x_0} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + k^2}} \tanh \left( \sqrt{x^2 + k^2} \right). \quad (D2)$$

Entonces, restando en ambos lados de (D2) un mismo término se tiene

$$\frac{1}{v_0 N(0)} - \int_0^{x_0} dx \frac{\tanh x}{x} = \int_0^{x_0} dx \left[ \frac{\tanh(x^2 + k^2)^{1/2}}{(x^2 + k^2)^{1/2}} - \frac{\tanh x}{x} \right]. \quad (D3)$$

Dado que  $\int_0^{x_0} dx (\tanh x/x) \approx \ln(2\hbar\omega_D \exp[\gamma]/\pi k_B T)$  para  $T \approx T_c$  y en particular  $T < T_c$ , y que  $1/v_0 N(0) \approx \ln(2\hbar\omega_D \exp[\gamma]/\pi k_B T_c)$ . Puede desarrollarse la siguiente expansión de Taylor

$$\begin{aligned} \ln(2\hbar\omega_D \exp[\gamma]/\pi k_B T) &\approx \ln(2\hbar\omega_D \exp[\gamma]/\pi k_B T_c) + \left\{ \left[ \frac{\pi k_B T}{2\hbar\omega_D \exp[\gamma]} \left( -\frac{2\hbar\omega_D \exp[\gamma]}{\pi k_B T^2} \right) \right]_{T=T_c} \times (T - T_c) \right\} \\ &= 1/v_0 N(0) + [(T_c - T)/T_c] = 1/v_0 N(0) + \delta T/T_c. \end{aligned} \quad (D4)$$

Entonces (D3) se puede escribir

$$-\frac{\delta T}{T_c} = \int_0^{x_0} dx \left[ \frac{\tanh(x^2 + k^2)^{1/2}}{(x^2 + k^2)^{1/2}} - \frac{\tanh x}{x} \right] \quad (D5)$$

la cual es desplegada en los intervalos  $[0,1]$  y  $[1,x_0]$ . Entonces, utilizando el desarrollo  $\tanh x = \sum_1^\infty [2^{2n}(2^{2n}-1)/(2n)!] x^{2n-1} B_{2n}$  (para  $|x| < \pi/2$ ), donde  $B_{2n}$  son los familiares números de Bernoulli [44, págs. 83-86]; por lo que

$$\frac{\tanh(x^2 + k^2)^{1/2}}{(x^2 + k^2)^{1/2}} = \sum_{n=1}^\infty \left\{ \frac{4^n(4^n-1)}{(2n)!} [x^{2n-2} + (n-1)x^{2n-4}k^2 + \vartheta(k^2)] B_{2n} \right\} \quad (D6)$$

y que considerando hasta el término  $k^2$  se puede expresar

$$\frac{\tanh(x^2 + k^2)^{1/2}}{(x^2 + k^2)^{1/2}} - \frac{\tanh x}{x} \approx \sum_{n=2}^\infty \left\{ \left[ \frac{4^n(4^n-1)}{(2n)!} \right] (n-1)x^{2n-4}k^2 B_{2n} \right\} \quad (D7)$$

en tanto el valor de la integral de (D5) en el intervalo  $[0,1]$  será

$$I_1 = \int_0^1 dx \left( \frac{\tanh(x^2 + k^2)^{1/2}}{(x^2 + k^2)^{1/2}} - \frac{\tanh x}{x} \right) = \frac{k^2}{2} \sum_{n=2}^\infty \left[ \frac{4^n(4^n-1)}{(2n)!} \frac{(2n-2)}{(2n-3)} B_{2n} \right]. \quad (D8)$$

Utilizando la fórmula de Stirling,  $(2n)! \approx 2^{2n+1} \sqrt{\pi n} (2n)^{2n+1/2} \exp(-2n)$ , para la expresión asintótica de  $B_{2n}$  se obtiene

$$B_{2n} = 4(-1)^{n-1} n^{2n} (\pi e)^{-2n} \sqrt{\pi n} \quad (D9)$$

por lo que nuestra aproximación para el valor de (D8) es

$$I_1 \approx -0.267838044k^2 - k^2(2/\pi)^{24} \sum_{l=0}^{\infty} ([2/\pi]^4)^l + k^2(2/\pi)^{26} \sum_{l=0}^{\infty} ([2/\pi]^4)^l =$$

$$(-0.267838044 - 2.3499 \times 10^{-5} + 9.5238 \times 10^{-6})k^2 = -0.267852019k^2. \quad (D10)$$

Por otro lado, para el intervalo  $[1, x_0]$  se tiene que la integral

$$I_2 = \int_1^{x_0} dx \left( \frac{\tanh(x^2 + k^2)^{1/2}}{(x^2 + k^2)^{1/2}} - \frac{\tanh x}{x} \right) = \int_1^{\infty} dx \left( \frac{\tanh(x^2 + k^2)^{1/2}}{(x^2 + k^2)^{1/2}} - \frac{\tanh x}{x} \right) -$$

$$\int_{x_0}^{\infty} dx \left( \frac{\tanh(x^2 + k^2)^{1/2}}{(x^2 + k^2)^{1/2}} - \frac{\tanh x}{x} \right) \quad (D11)$$

que para  $x_0$  grande, la última integral será aproximadamente cero. Y expandiendo en Taylor el integrando de la primera integral del lado derecho de (D11), se tiene

$$I_2 \approx \frac{1}{2}k^2 \int_1^{\infty} dx \left( \frac{\operatorname{sech}^2 x}{x^2} - \frac{\tanh x}{x^3} \right) \approx (-0.22501 + .071825)k^2 = -0.15319k^2. \quad (D12)$$

Donde la integral se estimó mediante sumas de Riemann. Sustituyendo los valores de  $I_1$  e  $I_2$  en (D5) se deduce que

$$-\frac{\delta T}{T_c} = \int_0^{x_0} dx \left[ \frac{\tanh(x^2 + k^2)^{1/2}}{(x^2 + k^2)^{1/2}} - \frac{\tanh x}{x} \right] \approx -0.42104k^2 \quad (D13)$$

como en la cercanía de  $T = T_c$ , se cumple que  $T^2 \approx T_c^2$ , entonces

$$\frac{\delta T}{T_c} = 0.42104 \left( \frac{\Delta^2}{4k_B^2 T_c^2} \right) \approx 0.10526 \left( \frac{\Delta^2}{k_B^2 T_c^2} \right) \quad (D14)$$

y por lo tanto

$$\Delta \approx 3.10k_B T_c \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/2}. \quad (D15)$$

Este valor obtenido tiene una dispersión del 1.3% del presentado en [31, págs. 447-449].

## APÉNDICE E Sistema Superfluido BCS en 2D a $T = 0$ K

### E.1 La Superfluidez en el $^3\text{He}$ y $^4\text{He}$ Líquidos

El  $^3\text{He}$  es un isótopo de abundancia natural muy pequeña, caso contrario con el isótopo  $^4\text{He}$  razonablemente abundante, que en sus fases líquida y sólida posee ciertas propiedades inusuales. El  $^3\text{He}$  llegó a ser accesible a mediados de los 50's con el crecimiento de arsenales nucleares en EUA y URSS.

Ambos isótopos de helio comparten la habilidad de permanecer en un estado fluido aún cuando se enfrían a temperaturas muy cercanas al cero absoluto. Sin embargo, las propiedades del  $^3\text{He}$  y del  $^4\text{He}$  en su fase líquida son notablemente diferentes a bajas temperaturas, debido al espín semientero que posee el núcleo del  $^3\text{He}$ , pues tal espín hace que los átomos de  $^3\text{He}$  se comporten como partículas de Fermi. En contraste, los átomos de  $^4\text{He}$  son partículas de Bose que tienen la tendencia a acumularse en el mismo estado a temperaturas muy bajas por el proceso de condensación de Bose-Einstein. De hecho, por debajo de aproximadamente los 2.2 K, el  $^4\text{He}$  líquido realiza una transición de fase a un estado superfluido, en el que una gran fracción de todos los átomos en el fluido se condensa en un sólo estado cuántico, y que por tanto pueden ser descritos por una función de onda cuántica macroscópica. Sin embargo, a temperaturas de casi tres órdenes de magnitud más cercanas al cero absoluto, el  $^3\text{He}$  líquido aún no presenta tal transición.

A temperaturas muy cercanas al cero absoluto, el comportamiento de los fluidos de Fermi es bastante inusual como lo muestran los electrones de conducción en los metales, desplazándose a velocidades del orden de una centésima de la velocidad de la luz. Debido a que los átomos de  $^3\text{He}$  son mucho más masivos que los electrones, sus velocidades son del orden de 50 m/s. Tal transición al estado superconductor que suelen presentar algunos fluidos de Fermi, puede ser descrito a través de una sola función de onda cuántica. Este comportamiento para una colección de Fermi fue entendido por primera vez por Bardeen Cooper y Schrieffer en su teoría BCS (1957), en la cual los electrones de conducción forman pares, llamados pares de Cooper, que se comportan como partículas de Bose. Lo cual fue corroborado por el estudiante de posgrado Douglas D. Osheroff en 1971, quien trabajaba con los profesores David Lee y Robert Richardson, al descubrir al azar la existencia de la transición de fase en una mezcla de  $^3\text{He}$  líquido y sólido a una temperatura de alrededor de 2.6 mK, en la que se encontraron 3 nuevas fases superfluidas. Estos son los únicos estados BCS hasta la fecha, en los cuales los pares de Cooper son magnéticos, que exhiben texturas del tipo cristal líquido en el cual las propiedades de los fluidos son distintas en diferentes direcciones, y cambian suavemente con la distancia.

### E.2 Monocapa Diluida de $^3\text{He}$ Sobre una Película Delgada de $^4\text{He}$ II

Los experimentos de Bhattacharyya y Gasparini sobre una monocapa diluida de  $^3\text{He}$  sobre una película delgada  $^4\text{He}$  II [49], indican que la interacción  $^3\text{He} - ^3\text{He}$  y la masa efectiva  $m^*$  de un solo  $^3\text{He}$  en un estado superficial puede variarse en un amplio intervalo, además que la película de  $^4\text{He}$  II se comporta como un substrato idealmente suave. Otra ventaja de este sistema es que la densidad  $n$  de  $^3\text{He}$  puede modificarse continuamente del caso extremadamente diluido al caso moderadamente diluido, en general  $0.0006A^{-2} < n < 0.018A^{-2}$ , lo que significa que la distancia interpartícula  $\gamma_0 \equiv (2/\sqrt{3}n)^{1/2}$  está en el intervalo  $8A < \gamma_0 < 45A$ , a lo cual puede dársele un tratamiento teórico menos complejo [50].



Aquí se examinan las propiedades de un sistema diluido degenerado de Fermi con interacciones y masa efectiva justo por encima del estado donde comienza el autoenlace de muchas partículas (MPSB), pues si ocurre MPSB el sistema será no diluido. Para evitar lo anterior se considera como sistema a la película  $^3\text{He} - ^4\text{He}$  II con un grosor de la película de  $^4\text{He}$  II entre 12.2Å y 18.8Å. De acuerdo a los argumentos de Miller y Nosanow (MN) que usan el teorema cuántico de estados correspondientes, la condición necesaria para MPSB en sistemas bidimensionales (2D) de Fermi a  $T = 0$  es la existencia de un estado ligado del dímero de onda  $S$  muy poco profundo para valores mayores del parámetro cuántico  $\eta$  al valor correspondiente en el que aparece MPSB. En el tratamiento MN, basado en el potencial de Lennard-Jones (LJ), la intensidad de interacción es parametrizada por el parámetro cuántico  $\eta \equiv \hbar^2/m\varepsilon\sigma^2$ , cuyo valor crítico para el inicio de MPSB es de  $\eta_{CF} = 0.19$  (de acuerdo con la aproximación variacional), valor que corresponde a la energía del estado ligado del dímero que es aproximadamente  $E_0 \sim -10^{-2}K$ . Por otro lado, el valor del parámetro cuántico al cual inicia el enlace del dímero es  $\eta_{DR} = 0.27$ . Dado que en general, la aproximación variacional nos proporciona la cota inferior del valor real de  $\eta_{CF}$ , y más aún, debido a que la interacción real entre las partículas  $^3\text{He}$  sobre la película de  $^4\text{He}$  II puede modificarse considerablemente por (LJ) al involucrar los diversos modos en la película de  $^4\text{He}$  II por el proceso de intercambio. Por lo anterior, no se puede confiar en los valores numéricos de MN. No obstante, es razonable la suposición de que dos partículas  $^3\text{He}$ , de masa efectiva  $m$  e interactuando, formen un estado ligado poco profundo de onda  $S$  [50].

Si bien es común expresar las propiedades del líquido de Fermi en términos de  $E_0$ , el cual puede ser visto como un parámetro fenomenológico cuyo valor corresponde a la aparición de MPSB, su cálculo suele ser difícil a partir de una teoría microscópica. Una aproximación de su valor ( $E_0 \equiv -\hbar^2/mb^2$ ) se da en base de considerar el hecho que tanto la distancia interpartícula  $\gamma_0$  como el tamaño  $b$  del dímero son mucho mayores que el alcance de interacción  $I_0$  de la fuerza. Que aunque no lo menciona Miyake, esta forma de  $E_0$  es propuesta a partir de suponer que las partículas  $^3\text{He}$  interactúan atractivamente mediante un pozo de potencial delta 2D regularizado.

En el estudio de las propiedades del líquido de Fermi en la fase normal, es común expresar estas propiedades en términos de un sólo parámetro  $\xi \equiv 1/k_F b(k_F) \equiv (2\pi n)^{1/2} = (4\pi/\sqrt{3})^{1/2} \gamma_0^{-1}$ . Por lo que al determinar los parámetros del líquido de Fermi en términos de  $\xi$  es posible especificar el valor de  $\xi$  (o  $E_0$ ) a partir de los experimentos [51]. De acuerdo con la definición de  $\xi$ ,  $\xi \ll 1$  cuando se consideran energías cercanas a  $T_F \equiv \hbar^2 K_F^2/2m^* = \varepsilon_F$ .

La naturaleza de un sistema diluido ha sido estudiado por Leggett [52], quien ha discutido en términos de la aproximación BCS la transición de estado de los pares de Cooper a temperaturas  $T > 0$ , pero  $T \ll \hbar^2/ml_0^2$  ( $\xi \ll 1$ ), al de una condensación de Bose de moléculas diatómicas ( $1 \ll \xi$ ) a  $T = 0$  conforme se varía el parámetro  $\xi = 1/k_F b$ .

En el caso  $\xi \ll 1$ , las ecuaciones básicas para  $T > 0$  (pero  $T \ll \hbar^2/ml_0^2$ ) ligeramente modificadas son

$$\Delta_k = - \sum_{k'} V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{2E_{k'}} \tanh(E_{k'}/2T) \quad (E1)$$

$$n = \sum_k \left[ 1 - \frac{\varepsilon_k - \mu}{E_k} \tanh(E_k/2T) \right] \quad (E2)$$

las cuales deben ser autoconsistentes en  $\Delta_k$  y  $\mu$ . La esencia de la versión 2D de la teoría de Legget es que en el límite diluido,  $(\gamma_0, b) \gg I_0$ , la interacción  $V_{kk'}$  puede ser eliminada al renormalizar la ecuación (E1) de la brecha, dando como resultado

$$\sum_k \left[ \frac{1}{E_k} \tanh(E_k/2T) - \frac{1}{\varepsilon_k + (\hbar^2/2mb^2)} \right] = 0 \quad (E3)$$

donde  $E_k = [(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2]^{1/2}$  con  $\Delta$  constante.

Una solución de las ecuaciones (E2) y (E3) en 2D a  $T = 0$  está dada por

$$\Delta = 2\varepsilon_F \xi = \sqrt{2B_2 E_F} \quad (E4)$$

$$\mu = \varepsilon_F(1 - \xi^2) = E_F - \frac{1}{2} B_2 \quad (E5)$$

si  $B_2 = -E_0 = \hbar^2/mb^2$  [49].

Por último, se puede notar que las ecuaciones (E4) y (E5), llamadas Ecuaciones de Miyake, tienen formas razonables en los siguientes dos casos límite: i) en el límite  $1 \ll \xi$ , se tiene  $\mu \simeq -\varepsilon_F \xi^2 = E_0/2$ ; y ii) en el límite  $\xi \ll 1$ ,  $\mu \simeq \varepsilon_F$  y  $\Delta = 2\varepsilon_F \xi = \hbar^2 k_F / mb$ .

## Apéndice F Lista de Símbolos

$k_B = 1.38 \times 10^{-23} J/K$	Constante de Boltzmann
$\beta = 1/k_B T$	
$\mu$	Potencial químico
$T_c$	Temperatura crítica
$T_D$	Temperatura de Debye
$\Delta(T)$	Brecha a la temperatura $T$
$\zeta(\sigma)$	Función zeta de Riemann de orden $\sigma$
$\Gamma(x)$	Función gamma
$z \equiv \exp(\mu_B/k_B T)$	Fugacidad
$g_\sigma(z)$	Integral de Bose
$N(\epsilon)$	Densidad de estados por unidad de volumen, por energía y espín
$V$	Intensidad del acoplamiento fermiónico
$\lambda \equiv N(\epsilon)V$	Constante de acoplamiento
$L^d$	Volumen $d$ -dimensional
$E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$	Energía de Fermi
$\omega_D$	Frecuencia de Debye
$E_S$	Energía asociada al estado superconductor
$E_n$	Energía asociada al estado normal

$v_k^2$	Probabilidad de que los estados del par $k$ están ocupados
$\epsilon_k = \xi_k \equiv \epsilon_k - \mu$	
$\theta(x)$	Función escalón de Heaviside
$E_k \equiv \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta^2(T)}$	Energía de excitación del par de Cooper
$f(E)$	Función de distribución de Fermi-Dirac
$\Omega(T, L^d, \mu, N_0, M_0)$	El gran potencial termodinámico
$F(T, N_0, M_0, \xi)$	Energía libre de Helmholtz
$N_0$	Número de Cp's-2e
$M_0$	Número de Cp's-2h
$N$	Número total de electrones
$n \equiv N/L^d$	Número de densidad de electrones
$n_B$	Número de densidad de Cp's-2e con $K \geq 0$
$m_B$	Número de densidad de Cp's-2h con $K \geq 0$
$n_f(T)$	Número de densidad de electrones desapareados
$\delta(\mathbf{r})$	Función delta de Dirac
$\gamma = 0.5772156 \dots$	Constante de Euler-Mascheroni
$v_0(R)$	Intensidad del pozo
$\delta_0(k)$	Cambio de fase de la onda $S$
$E_i(x) = \int_x^\infty dt[\exp(-t)/t]$	Función de error
$m^*$	Masa efectiva
$\gamma_0$	Distancia interpartícula
$\xi \equiv 1/k_F b(k_F)$	
$E_0$	Energía del estado ligado del dímero
$I_0$	Alcance de interacción de la fuerza

## REFERENCIAS

1. M. Casas, M. Fortes, S. Fujita, J.M. Getino, M. de Llano, O. Rojo, H. Rubio y M.A. Solís, *Rev. Ciencia y Desarrollo* **129**, 42 (1996).
2. J. Bardeen, L.N. Cooper y J.R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
3. V.V. Tolmachev, *Phys. Lett. A* **266**, 400 (2000).
4. M. de Llano y V.V. Tolmachev, *Physica A* **317**, 546 (2003).
5. M. de Llano, *Frontiers in Superconductivity Research* (Nova Science Publishers, NY, 2004).
6. M. de Llano y V.V. Tolmachev, *Ukrainian J. Phys.* **55**, 79 (2010).
7. M. Grether, M. de Llano y V.V. Tolmachev, *Int. J. Quant. Chem.*, **112**, 3018 (2012).
8. S. Fujita y S. Watanabe, *J. Supercond.* **5**, 219 (1992) y referencias allí citadas; S. Fujita y S.

- Godoy, *Quantum Statistical Theory of Superconductivity* (Plenum Press, NY, 1996).
9. M. Casas, S. Fujita, M. de Llano, A. Puente, A. Rigo y M.A. Solís, *Physica C* **295**, 93 (1998).
  10. J.M. Williams, A.J. Schultz, U. Geiser, K.D. Carlson, A.M. Kini, H.H. Wang, W.K. Kwok, M.H. Whangbo y J.E. Schirber, *Science* **252**, 1501 (1991); D. Jérôme, *ibid*, pág. 1509; A. Khurana, *Phys. Today* **45**, 17 (1990).
  11. M. Casas, A. Rigo, M. de Llano, O. Rojo y M.A. Solís, *Physics Letters A* **245**, 55 (1998).
  12. V.C. Aguilera-Navarro, M. de Llano y M.A. Solís, *Eur. J. Phys.* **20**, 177 (1999).
  13. R.K. Patria, *Statistical Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1972) págs. 177, 211, 501.
  14. S. Fujita, T. Kimura y Y. Zheng, *Found. Phys.* **21**, 1117 (1991); S. Fujita, *J. Supercond.* **4**, 297 (1991); **5**, 83 (1992); S. Fujita y S. Watanabe, *J. Supercond.* **5**, 219 (1992); S. Fujita y S. Godoy, *Quantum Statistical Theory of Superconductivity* (Plenum Press, New York, 1996).
  15. J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity* (Benjamin, New York, 1964) pág. 33.
  16. L. Belkhir y M. Randeria, *Phys. Rev. B* **49**, 6829 (1994).
  17. D. Jérôme, L. Balicas, K. Behnia, W. Kang, P. Wzietek, L. Hubert y C. Bourbonnais, *Physica B* **206/207**, 559 (1995); N. Dupuis, G. Montambaux, *Phys. Rev. B* **49**, 8993 (1994); J.M. Williams, A.J. Schultz, U. Geiser, K.D. Carlson, A.M. Kini, H.H. Wang, W.K. Kwok, M.H. Whangbo y J.E. Schirber, *Science* **252**, 1501 (1991); D. Jérôme, *Science* **252**, 1509 (1991); A. Khurana, *Phys. Today* **43**, 17 (1990).
  18. A. Hebard, *Phys. Today* **45**, 26 (1992).
  19. R.M. Ziff, G.E. Uhlenbeck y M. Kac, *Phys. Rep.* **32**, 169 (1977).
  20. V.C. Aguilera-Navarro *et al.*, *Cond. Matter Theories*, ed. R.V. Panat, Vol. 12 (Nova, New York, 1997).
  21. N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt, Rinehart, Winston, New York, 1976) pág. 53.
  22. 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* **223**, 186-188 (1993).
  23. D.R. Harshman y A.P. Mills, *Phys. Rev. B* **45**, 10684 (1992); R. Micnas *et al.*, *op. cit.*
  24. F. London, *Nature (London)* **141**, 643 (1938).
  25. D.M. van der Walt, R.M. Quick y M. de Llano, *J. Math. Phys.* **34**, 3980 (1993).

26. V.C. Rozada, *Superconductividad y Magnetismo a través de la Espectroscopia Túnel de Barrido con Punta Superconductora*, Tesis doctoral (2009) pág 22. Universidad Autónoma de Madrid, Departamento de Física de la Materia Condensada.
27. J. Batle, M. Casas, M. Fortes, M. de Llano, F.J. Sevilla, M.A. Solís y V.V. Tolmachev, *Conds. Mat. Theor.* **18**, 111 (2003).
28. R. Friedberg y T.D. Lee, *Phys. Rev. B* **40**, 6745 (1989).
29. R. Friedberg, T.D. Lee y H.C. Ren, *Phys. Lett. A* **152**, 417 y 423 (1991).
30. S.K. Adhikari, M. de Llano, F.J. Sevilla, M.A. Solís y J.J. Valencia, *Physica C* **453**, 37 (2007).
31. A.L. Fetter y J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, NY, 1971) ecuación (4.14).
32. N.N. Bogoliubov, *J. Phys. (URSS)* **11**, 23 (1947).
33. T.D. Lee y otros, *Phys. Rev. B* **42**, 6745 (1989); *ibid*, *Phys. Letters A* **152**, 417 y 423 (1990).
34. M. Casas, N.J. Davidson, S. Fujita, M. de Llano, A. Puente, R.M. Quick y A. Rigo, *Physica A* **295**, 146 (2001).
35. M. Casas, A. Puente, A. Rigo, M. de Llano y M.A. Solís, *J. Phys. Chem. Sol.* **123**, 101 (2002).
36. M. Casas, A. Puente, A. Rigo, M. de Llano y M.A. Solís, *Sol. State Comm.* **123**, 101 (2002).
37. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley, USA, 1986) pág.343.
38. J.F. Annett, *Superconductivity, Superfluids and Condensates* (Oxford University Press, NY, 2004) pág. 70.
39. C.P. Poole, H.A. Farach, R.J. Creswick y R. Prozorov, *Superconductivity* (Academic Press Elsevier, USA, 2007).
40. M. de Llano, *Mecánica Cuántica* (Editorial Las Prensas de Ciencias, primera reimpresión, (2006) pág. 122.
41. D.L. Goodstein, *States of Matter* (Dover, NY, 1985) pág. 612.
42. M. de Llano, A. Salazar y M.A. Solís, *Rev. Mex. Fís.* **51**, 626 (2005).
43. S. Gasiorowicz, *Quantum Physics* (J. Wiley & Sons, NY, 1996) pág. 89.
44. M. Abramowitz y L.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, NY, 1964) pág. 361.

45. E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (J. Wiley & Sons, NY, 1998) pág. 257.
46. G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists* (Academic Press, NY, 2001) pág. 722.
47. D.A. Park, *Introduction to the Quantum Theory* (McGraw-Hill, NY, 1974) pág. 234.
48. P. Gosdzinsky y R. Tarrach, *Am. J. Phys.* **59**, 70 (1990).
49. B. Bhattacharyya y F.M. Gasparini, *Phys. Rev.* **49**, 919 (1982).
50. K. Miyake, *Prog. Theor. Phys.* **69**, 1794 (1983).
51. J. Bardeen, G. Baym y D. Pines, *Phys. Rev.* **17**, 372 (1966); *Phys. Rev.* **156**, 207 (1967).
52. A.J. Leggett, en el tomo *Modern Trends in the Theory of Condensed Matter* (Springer-Verlag, Berlin, 1980) pág 14.