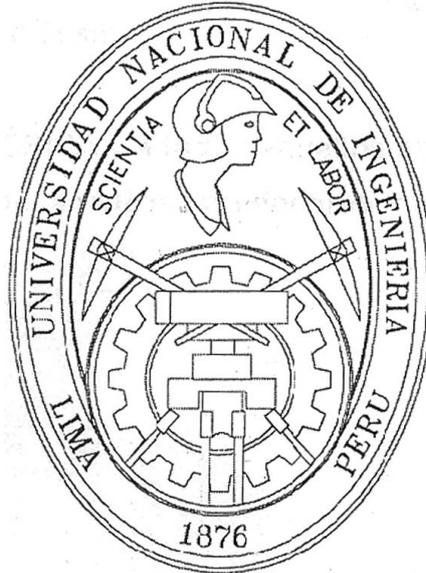


UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA
FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA PROFESIONAL DE FÍSICA



TESIS PARA OPTAR EL TITULO PROFESIONAL
DE LICENCIATURA, ESPECIALIDAD: FÍSICA

TITULADA:

MODELO DE SUPERCONDUCTOR

PRESENTADA POR:

RAFAEL DIEGO PÉREZ COLLANTES

LIMA - PERÚ

2001

ÍNDICE

INTRODUCCIÓN	1
CAPÍTULO 1.- LAS ECUACIONES ELECTROMAGNÉTICAS DE UN SUPERCONDUCTOR.	2
1.1 INTRODUCCION	2
1.2 PREDICCIONES DEL MODELO DE DRUDDE	3
1.3 LAS ECUACIONES DE MAXWELL-LONDON	7
1.4 CONCLUSIONES	10
CAPÍTULO 2.- MODELO SIMPLE DEL PROCESO DE CONDENSACIÓN DE UN GAS DE ELECTRONES	11
2.1 GAS DE ELECTRONES	11
2.2 FUNCIÓN DE ONDA DE UN PAR DE ELECTRONES EN INTERACCIÓN BAJO UN POTENCIAL EFECTIVO	13
2.3 DESARROLLO DE FOURIER DE LA FUNCIÓN DE ONDA DE UN PAR DE ELECTRONES	16
2.4 SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRODINGER ESTACIONARIA EN COORDENADAS RELATIVAS	18
2.5 POTENCIAL EFECTIVO DE TIPO ATRACTIVO	20
2.6 ENERGÍA DE LIGADURA	21
2.7 MOMENTO ANGULAR INTRÍNSECO	22
2.8 CONCLUSIONES	22
CAPÍTULO 3.- EL HAMILTONIANO BCS-GORKOV	23
3.1 INTRODUCCIÓN	23
3.2 PROCESO DE CUANTIFICACIÓN	23
3.3 POTENCIAL DE INTERACCIÓN	26

3.4	PROMEDIO ESTADÍSTICO DE UN OPERADOR	28
3.5	DIAGONALIZACIÓN DE H_k	30
3.6	CONCLUSIONES	31

CAPÍTULO 4.- CÁLCULO DE ALGUNAS MAGNITUDES

MEDIBLES	33
-----------------	-----------

4.1	ENERGÍA LIBRE DE HELMHOLTZ	33
4.2	TEMPERATURA CRÍTICA	42
4.3	CAPACIDAD CALORÍFICA	44
4.4	CONCLUSIONES	45

APÉNDICE A	46
-------------------	-----------

APÉNDICE B	47
-------------------	-----------

APÉNDICE C	47
-------------------	-----------

APÉNDICE D	48
-------------------	-----------

BIBLIOGRAFÍA	49
---------------------	-----------

RESUMEN

En el capítulo I analizamos las propiedades electromagnéticas de un material superconductor: Conductividad infinita y efecto Meissner. Mostramos que la propiedad de conductividad infinita no da cuenta del efecto Meissner, por último agregamos a las ecuaciones de Maxwell dos nuevas ecuaciones que caracterizan a las propiedades antes mencionadas.

En el capítulo II elaboramos un modelo cuántico sencillo para explicar el proceso de “condensación” de los electrones en el estado superconductor.

En el capítulo III y parte del capítulo IV, en donde más que elaborar un modelo cuántico para explicar la superconductividad en metales, analizamos la consistencia del modelo BCS-Gorkov planteado por G. Eilenberger.

En el capítulo IV calculamos algunas magnitudes medibles tales como la temperatura crítica, y la diferencia entre las capacidades caloríficas de los estados superconductor y normal de los materiales metálicos (asociado sólo a los electrones), basándonos en los resultados obtenidos en el capítulo III.

CAPÍTULO 1

LAS ECUACIONES ELECTROMAGNÉTICAS DE UN SUPERCONDUCTOR

1.1 INTRODUCCIÓN

A continuación citaremos las dos propiedades electromagnéticas fundamentales en un material superconductor.

(1) La alta conductividad eléctrica

Kamerlingh Onnes[1], en 1911, experimentando con Hg, descubrió que al descender la temperatura hasta el orden de unos cuantos kelvin, la resistencia eléctrica del Hg (sólido) disminuía considerablemente de acuerdo a los valores de la siguiente tabla

Temperatura (en K)	Resistencia (en ohm)
273	39.7
4,3	0.084
3	3×10^{-6}
1.3	3×10^{-6}

Así como el Hg, otros materiales (metales y aleaciones) manifestarán cambios muy significativos en la resistencia a una temperatura lo suficientemente baja. La temperatura a la cual la muestra sufre un cambio de estado de resistencia eléctrica normal a un estado de muy

INTRODUCCIÓN

En la actualidad se estudian las propiedades de los materiales superconductores de “alta temperatura” (por ejemplo los cerámicos), en el rango aproximado de 10 K a 120 K de temperatura crítica, siendo el avance experimental muy amplio. En cambio en la parte teórica, hasta ahora, no hay un modelo que explique de manera global el problema. En el caso de los materiales metálicos se ha conseguido explicar de una manera satisfactoria a través de la Teoría BCS y variantes el fenómeno de la superconductividad, cabe señalar que los materiales metálicos son buenos conductores pero malos superconductores a temperaturas alejadas de 0 K, ya que su temperatura crítica se encuentra por lo general por debajo de $T < 5$ K (superconductividad a bajas temperaturas).

Las propiedades fundamentales de los materiales superconductores no son tan fáciles de entender, ya que necesitan de un conocimiento integral de la física (mecánica cuántica, electromagnetismo, termodinámica y física del estado sólido). La Teoría BCS explica la superconductividad en los metales, pero lo hace recurriendo a elementos sofisticados; por ello resulta interesante presentar otro modelo o variante de la Teoría BCS, como el de la presente Tesis, que permita analizar y reforzar la consistencia de dicho modelo.

baja resistencia “superconductor” se llama temperatura crítica (T_c). En la actualidad existen materiales cerámicos con un T_c alrededor de 100 K.

(2) El efecto Meissner

No sólo existen cambios significativos en las propiedades eléctricas, sino también en las propiedades magnéticas del material. Cuando un material masivo (no película delgada) se coloca en un campo magnético y se enfría por debajo de la temperatura de transición, el flujo magnético originalmente presente en el interior del material, es expulsado y concentrado en una capa superficial del mismo, a esta propiedad se le da el nombre de efecto Meissner[2].

En algunos materiales (no metálicos) el efecto Meissner puede producirse parcialmente, es decir el campo magnético penetra más de lo que se esperarfa. Los materiales que presentan un efecto Meissner total reciben el nombre de tipo I, y en los que el efecto es parcial se les llama de tipo II.

1.2 PREDICCIONES DEL MODELO DE DRUDE[3]

A continuación veamos si las propiedades (1) y (2) se encuentran relacionadas¹. La propiedad (1) la podemos representar teniendo en cuenta las propiedades eléctricas de un material conductor perfecto, las cuales se pueden obtener según el modelo de Drude que establece que la ecuación clásica del movimiento de los electrones en un material conductor sometido a un campo eléctrico E es

$$q\bar{E} + \bar{f} = m_q \frac{d\bar{V}}{dt} \quad (1.1)$$

donde $\bar{f} = -\frac{m_q}{\tau} V$ esta asociado a la resistencia eléctrica del medio, V es la velocidad de arrastre o desplazamiento de los electrones y $1/\tau$ es una constante que caracteriza a las colisiones de los electrones con las vibraciones de la red, imperfecciones e impurezas (τ es el llamado tiempo de relajación, y es muy grande cerca de $T = 0$ K).

Sea $\ell(T)$ el camino libre medio de los electrones, en el caso de los metales se sabe que tanto $\ell(T)$ y $\tau(T)$ decrecen al aumentar la temperatura T . Si analizamos el movimiento promedio de los electrones durante un intervalo de tiempo próximo a $\tau(T)$, para $T \approx 0K$, entonces $\frac{1}{\tau(T)} \approx 0$, esto permite escribir (1.1) como

¹Sólo consideraremos materiales de tipo I, en donde el efecto Meissner es total.

$$q\bar{E} = m_q \frac{d\bar{V}}{dt} \quad (1.2)$$

Ahora asumiremos que el campo eléctrico E varía muy poco espacialmente ($\nabla \cdot V = 0$), lo cual nos permite escribir $\frac{d\bar{V}}{dt} \approx \partial_t \bar{V} \equiv \frac{\partial \bar{V}}{\partial t}$, entonces (1.2) toma la forma

$$q\bar{E} = m_q \partial_t \bar{V} \quad (1.3)$$

Como sabemos, la expresión correspondiente a la densidad de corriente está dado por

$$\bar{J} = nq\bar{V} \quad (1.4)$$

donde n es la concentración de portadores de carga ($\frac{\# \text{ de portadores}}{\text{unidad de volumen}}$).

Derivemos (1.4) parcialmente respecto al tiempo, y combinemos con (1.3), lo cual nos da

$$\frac{m_q}{nq^2} \partial_t \bar{J} = \bar{E}. \quad (1.5)$$

Sea la constante $\Gamma = \frac{m_q}{nq^2}$, con lo cual (1.5) toma la forma

$$\Gamma \partial_t \bar{J} = \bar{E}. \quad (1.6)$$

La expresión (1.6) sería una expresión candidata a representar la propiedad de alta conductividad eléctrica en los superconductores metálicos.

Veamos si (1.6) da cuenta del efecto Meissner; para esto consideremos las ecuaciones de Maxwell[3]:

$$\nabla \cdot \bar{D} = \rho \quad (1.7)$$

$$\nabla \times \bar{H} = \bar{J} + \partial_t \bar{D} \quad (1.8)$$

$$\nabla \times \bar{E} + \partial_t \bar{B} = \bar{0} \quad (1.9)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = \bar{0} \quad (1.10)$$

Donde $D = \epsilon_0 E + P = \epsilon E$ y $H = \frac{1}{\mu_0} B - M = \frac{1}{\mu} B$. Consideremos un material metálico homogéneo e isotrópico, entonces ϵ y μ son cantidades escalares constantes espacial y temporalmente. De (1.6) y (1.9) obtenemos

$$\nabla \times (\Gamma \partial_t \vec{J}) = \nabla \times \vec{E} = -\partial_t \vec{B} = -\mu \partial_t \vec{H}, \quad (1.11)$$

de (1.8) y (1.9) encontramos que $\nabla \times \vec{J} = \nabla \times (\nabla \times H) - \nabla \times \partial_t D = \nabla \times (\nabla \times H) - \partial_t \nabla \times D = \nabla \times (\nabla \times H) + \epsilon \mu \partial_{tt} H$, entonces

$$\nabla \times \vec{J} = \nabla \times (\nabla \times H) + \epsilon \mu \partial_{tt} H \quad (1.12)$$

recordemos la siguiente identidad vectorial

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{F}) = \nabla (\nabla \cdot \vec{F}) - \nabla^2 \vec{F} \quad (1.13)$$

tomemos $F = H$ en (1.13) y de acuerdo a (1.10) obtenemos

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{H}) = -\nabla^2 \vec{H} \quad (1.14)$$

(1.14) en (1.12) nos da

$$\nabla \times \vec{J} = -\nabla^2 \vec{H} + \epsilon \mu \partial_{tt} \vec{H} \quad (1.15)$$

si derivamos parcialmente (1.15) respecto al tiempo y usamos (1.11) encontramos

$$\frac{\mu}{\Gamma} \partial_t \vec{H} = \nabla^2 \partial_t \vec{H} - \epsilon \mu \partial_{ttt} \vec{H} \quad (1.16)$$

sea $G = \partial_t H$, con lo cual (1.16) toma la forma

$$\frac{\mu}{\Gamma} \vec{G} = \nabla^2 \vec{G} - \epsilon \mu \partial_{tt} \vec{G} \quad (1.17)$$

de (1.17) no podemos observar directamente el comportamiento de G , debemos proceder a

resolver dicha ecuación.

Busquemos una posible solución de (1.17) en la forma de una onda avanzando según \bar{q} , es decir

$$G = G_0 e^{(i\bar{q}\cdot\bar{r} - i\omega t)} \quad (1.18)$$

entonces

$$\nabla^2 \bar{G} = -q^2 \bar{G} \quad (1.19)$$

$$\partial_{tt} \bar{G} = -\omega^2 \bar{G} \quad (1.20)$$

(1.19) y (1.20) en (1.17) nos da

$$-q^2 \bar{G} + \varepsilon \mu \omega^2 \bar{G} = \frac{\mu}{\Gamma} \bar{G} \quad (1.21)$$

entonces $(-q^2 + \varepsilon \mu \omega^2 - \frac{\mu}{\Gamma}) G = 0 \Rightarrow$

$$q^2 = \varepsilon \mu \omega^2 - \frac{\mu}{\Gamma} \quad (1.22)$$

si $q \in \mathbb{R}$ entonces

$$\varepsilon \omega^2 > \frac{1}{\Gamma}, \quad q = \pm \left(\varepsilon \mu \omega^2 - \frac{\mu}{\Gamma} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.23)$$

si $i q \in \mathbb{R}$ entonces

$$\varepsilon \omega^2 < \frac{1}{\Gamma}, \quad q = \pm i \left(\frac{\mu}{\Gamma} - \varepsilon \mu \omega^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.24)$$

reemplazando (1.23) en (1.18) obtenemos la ecuación de una onda viajera, lo cual corresponde a $\varepsilon \omega^2 > \frac{1}{\Gamma}$. Si consideramos (1.24) en (1.18) obtenemos la ecuación de una onda que se atenúa (descartando la solución que crece) espacialmente, lo cual corresponde a $\varepsilon \omega^2 < \frac{1}{\Gamma}$, es decir para una frecuencia $\omega < \left(\frac{1}{\varepsilon \Gamma}\right)^{\frac{1}{2}}$ la onda se atenúa espacialmente en el interior del material. Lo mencionado anteriormente se puede apreciar fácilmente si tomamos $\bar{r} = z \hat{k}$ y $\bar{q} = q \hat{k}$, donde $q = \pm i \left(\frac{\mu}{\Gamma} - \varepsilon \mu \omega^2\right)^{\frac{1}{2}}$, lo cual debemos reemplazar en (1.18) para obtener lo siguiente

$$\bar{G} = \bar{G}_0 e^{(\pm q^{(a)} z - i \omega t)}, \quad q^{(a)} = \left(\frac{\mu}{\Gamma} - \varepsilon \mu \omega^2\right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.25)$$

debemos tomar el signo (-) para que G no aumente indefinidamente cuando z sea grande².

²Notemos que z es medido a partir de la superficie del material. Las soluciones de las ecuaciones de Maxwell

Entonces

$$G = G_0 e^{(-q^{(a)}z - i\omega t)}. \quad (1.26)$$

Tengamos en cuenta que la expresión (1.26) corresponde al comportamiento de $G = \partial_t H$ y no de H , que es lo que nos interesa.

1.3 LAS ECUACIONES DE MAXWELL - LONDON

De acuerdo al modelo de Drude hemos obtenido que la propiedad de conducción eléctrica no explica el efecto Meissner; sin embargo el procedimiento efectuado sugiere cual debería ser la expresión que dé cuenta de dicho efecto. De (1.11) tenemos

$$\partial_t (\nabla \times (\Gamma \bar{J}) + \mu H) = \bar{0} \quad (1.27)$$

$$\nabla \times (\Gamma \bar{J}) + \mu H = s(\bar{r}) \quad (1.28)$$

si tomamos $s(\bar{r}) = \bar{0}$ en (1.28) obtenemos

$$\nabla \times (\Gamma \bar{J}) + \mu H = \bar{0} \quad (1.29)$$

partiendo de (1.29) y siguiendo un procedimiento similar al efectuado para encontrar la ecuación (1.17), obtenemos

$$\frac{\mu}{\Gamma} \bar{H} = \nabla^2 \bar{H} - \varepsilon \mu \partial_{tt} \bar{H} \quad (1.30)$$

como ya sabemos esta expresión tiene como posible solución

$$\bar{H} = \bar{H}_0 e^{(-q^{(a)}z - i\omega t)}, \quad \omega < \left(\frac{1}{\varepsilon \Gamma}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad q^{(a)} = \left(\frac{\mu}{\Gamma} - \varepsilon \mu \omega^2\right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.31)$$

lo cual significa que H se atenúa espacialmente, es decir solo tiene un valor significativo cerca a la superficie del conductor, por lo tanto la elección de $s(\bar{r}) = \bar{0}$ no ha sido arbitraria; sino que tal asunción está estrechamente relacionada con la evidencia experimental existente (efecto Meissner). Para poder cuantificar hasta que distancia el valor de H es significativo vamos a

deben considerarse a partir de las condiciones de contorno.

definir la longitud de onda de penetración (γ). Se define γ como la distancia para el cual el valor de H se ha reducido hasta $1/e$ de su valor en la superficie del conductor,

$$\gamma = \frac{1}{q(a)} = \left(\frac{\mu}{\Gamma} - \varepsilon\mu\varpi^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (1.32)$$

de (1.31) tenemos $\varpi < \left(\frac{1}{\varepsilon\Gamma} \right)^{\frac{1}{2}}$, para cuantificar el valor de γ consideremos $\varpi \ll \left(\frac{1}{\varepsilon\Gamma} \right)^{\frac{1}{2}}$, entonces $\varpi^2 \rightarrow 0$, y

$$\lambda_0 = \left(\frac{\mu}{\Gamma} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (1.33)$$

reemplacemos $\Gamma = \frac{m_q}{nq^2}$ en (1.33), obtenemos

$$\lambda_0 = \left(\frac{m_q}{nq^2\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.34)$$

consideremos valores típicos, en un metal, para las cantidades involucradas en (1.34), tenemos

$$n = 8 \times 10^{28} \frac{\text{electrones}}{m^3}$$

$$m_q = m_e = 9.1091 \times 10^{-31} \text{kg}$$

$$q = e = -1.6021 \times 10^{-19} \text{C}$$

$$\Gamma = 0.44 \times 10^{-21} \text{kg.m}^{-3}.\text{C}^{-2}$$

si

$$\mu = \mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{kg.m.C}^{-2}$$

$$\Rightarrow \lambda_0 = 1.88 \times 10^{-8} \text{m} = 188 \text{ \AA}$$

Nótese que λ_0 es muy pequeño comparado con las dimensiones geométricas de un conductor masivo, por lo tanto H se concentra en una capa superficial del conductor. De acuerdo a la expresión (1.32) podemos encontrar un valor crítico para ϖ , el cual es $\varpi_0 = \left(\frac{1}{\varepsilon\Gamma} \right)^{\frac{1}{2}}$, para este valor o un valor superior, H ha penetrado totalmente la muestra conductora (ver 1.23); éste resultado también está de acuerdo con el hecho experimental de que a partir de cierta frecuencia

, de H , el campo magnético penetra totalmente en los materiales de tipo I.

Por otra parte si adicionamos a la expresión (1.6) el termino $-\nabla f$ vemos que no afecta en nada la deducción de (1.29), ya que en la deducción de dicha expresion aparece el termino $\nabla \times (\nabla f) = 0$. La expresión representativa de la alta conductividad de un superconductor sería entonces

$$\Gamma \left(\partial_t \bar{J} - \frac{\nabla f}{\Gamma} \right) = \bar{E} \quad (1.35)$$

En el Apéndice A mostramos como f esta relacionado con la densidad de carga ρ de acuerdo a las ecuaciones de Maxwell, dicha relación es

$$f = -c^2 \Gamma \rho \quad (1.36)$$

reemplazando (1.36) en (1.35) obtenemos

$$\Gamma (\partial_t \bar{J} + c^2 \nabla \rho) = \bar{E} \quad (1.37)$$

Las ecuaciones de Maxwell, más las ecuaciones (1.37) y (1.29), son las llamadas ecuaciones de Maxwell - London[4], las cuales son:

$$\nabla \cdot D = \rho \quad (1.38)$$

$$\nabla \times H = \bar{J} + \partial_t D \quad (1.39)$$

$$\nabla \times \bar{E} + \partial_t \bar{B} = \bar{0} \quad (1.40)$$

$$\nabla \times \bar{B} = \bar{0} \quad (1.41)$$

$$\nabla \times (\Gamma \bar{J}_s) + \mu \bar{H} = \bar{0} \quad (1.42)$$

$$\Gamma (\partial_t \bar{J}_s + c^2 \nabla \rho) = \bar{E} \quad (1.43)$$

Como podemos apreciar en las ecuaciones (1.42) y (1.43) hemos colocado un sub-índice en \bar{J}

para especificar que estas expresiones sólo corresponden al estado superconductor. En cambio (1.39) vale en todos los casos; por ejemplo, en el estado superconductor $\bar{\mathcal{J}} = \bar{\mathcal{J}}_s$.

1.4 CONCLUSIONES

1. Las propiedades magnéticas de un material en el estado superconductor no pueden basarse en la hipótesis de que el estado superconductor está caracterizado por las propiedades de un conductor ideal, como se ve de (1.26).

2. Las ecuaciones de Maxwell no predicen las propiedades electromagnéticas de los superconductores. Son las ecuaciones de Maxwell - London las que además de explicar las propiedades de un material en el estado superconductor dan cuenta de todas las otras propiedades electromagnéticas conocidas de cualquier material.

3. No sólo el campo eléctrico, la densidad de carga y la densidad de corriente en un material conductor masivo en el estado superconductor manifiestan un comportamiento superficial sino también el campo magnético.

Chapter 2

MODELO SIMPLE DEL PROCESO DE CONDENSACIÓN DE UN GAS DE ELECTRONES

2.1 GAS DE ELECTRONES

INTRODUCCIÓN

Muchas de las propiedades de los metales (conductividad eléctrica, capacidad calorífica, etc) se pueden explicar teniendo en cuenta el modelo cuántico de un gas de “electrones libres” (GEL).^{1,2}

Veamos ahora el problema de la superconductividad. Consideremos un metal en estado normal; al descender la temperatura hasta un valor igual o menor que cierta temperatura crítica, éste pasa a un estado especial llamado estado superconductor.³ Este nuevo estado se puede explicar teniendo en cuenta una interacción efectiva de tipo atractivo entre cada par de

¹Para explicar la conductividad eléctrica en los metales sólo se necesita considerar el modelo clásico del gas de electrones libres.

²Debemos recordar que estos electrones no son totalmente libres, ya que están sujetos a un potencial periódico debido a los iones de la red.

³La superconductividad no es una propiedad de una nueva clase de materiales como es el caso de los aislantes ($10^{22} \frac{\text{electrones}}{\text{cm}^3}$), semiconductores ($10^{12} \frac{\text{electrones}}{\text{cm}^3}$) y buenos conductores ($10^{22} \frac{\text{electrones}}{\text{cm}^3}$); sino un nuevo estado de la materia como lo es, por ejemplo el gas, líquido o sólido.

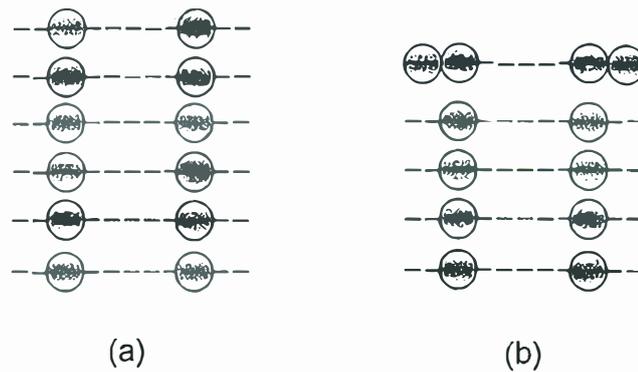


Figura 2-1: En la parte (a) de este gráfico hemos representado al estado fundamental del gas de Fermi. En la parte (b) tenemos una posible representación del estado fundamental de un gas de electrones en interacción, donde los pares de electrones son ahora bosones, no sometidos al principio de exclusión de Pauli.

electrones.^{4,5}

El estado fundamental del gas de “electrones libres” corresponde al mar de Fermi lleno, lo cual corresponde a una energía mínima.⁶ Es posible cambiar este estado fundamental a otro, que estaría representado por otra energía mínima, si consideramos la interacción atractiva entre los electrones mencionada líneas arriba; en este caso nuestro sistema estaría formado por electrones corrientes y pares de electrones acoplados (véase la fig. 2.1).

Los electrones que se acoplan son aquellos que tienen un momentum lineal total y momentum angular intrínseco total iguales a cero, sin que coincidan espacialmente. Esto no significa que el momentum lineal (o angular) de cada partícula sea igual a cero.⁷ Además debemos mencionar que los electrones mas energéticos en el GEL, los que están cerca al nivel de Fermi, son sólo

⁴Esta interacción se encuentra mediada por la red de iones de la forma siguiente: Un electrón interactúa con la red, el otro siente la perturbación de la red, dando lugar a una interacción atractiva entre ambos electrones.

⁵Debemos tener en cuenta que esta interacción esta representada por un potencial que es función de la temperatura crítica. Por ejemplo: El paso de gas a líquido en una sustancia es también controlado por la temperatura de condensación de la sustancia considerada.

⁶Este estado es estable bajo excitaciones en dicho gas; pero bajo una perturbación causada por la temperatura, cercana a la temperatura crítica, se vuelve inestable.

Se produce un cambio en la estructura de los niveles debido a la interacción atractiva entre los electrones, en consecuencia cambia el estado fundamental.

⁷Recuerde por ejemplo que la fuerza magnética sobre un circuito cerrado inmerso en un campo magnético uniforme es cero; pero esto no significa que la fuerza magnética sobre cada parte del circuito sea cero.

aquellos que se aparean.⁸

Lo que vamos a desarrollar a continuación servirá para mostrar un modelo simplificado del proceso de condensación en el espacio momentum de un gas de electrones.

2.2 FUNCIÓN DE ONDA DE UN PAR DE ELECTRONES EN INTERACCIÓN BAJO UN POTENCIAL EFECTIVO.

Empecemos nuestro estudio considerando la función de onda de un par arbitrario de electrones del GEL, $\varphi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$, donde \bar{r}_1 y \bar{r}_2 son las variables espaciales correspondientes a un par.

Es conveniente expresar $\varphi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$ en coordenadas relativas. Para lograr ésto hagamos la siguiente transformación

$$\begin{aligned}\bar{r} &= \bar{r}_1 - \bar{r}_2 \\ R &= \frac{m\bar{r}_1 + m\bar{r}_2}{2m} = \frac{\bar{r}_1 + \bar{r}_2}{2}\end{aligned}\tag{2.1}$$

donde R es la variable correspondiente al centro de masa.

De acuerdo a lo expresado anteriormente

$$\varphi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \tilde{\varphi}(\bar{r}, R)$$

para poder expresar $\tilde{\varphi}$ en coordenadas separables es necesario conocer la forma del potencial efectivo de interacción. Es conocido que el potencial de interacción entre dos cuerpos, en este caso tomaremos el potencial efectivo (V_{ef}), depende sólo del modulo de $\bar{r}_1 - \bar{r}_2$,⁹

$$V_{ef} \equiv V(|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|)\tag{2.2}$$

Por lo tanto podemos ensayar

⁸Son los electrones de mayor energía los que primero se ven afectados por los cambios. Podemos mencionar por ejemplo en el proceso de ebullición de un líquido, son las moléculas mas energéticas las que se vaporizan.

⁹Recuerde que estamos considerando hasta ahora una interacción arbitraria (no necesariamente la de Coulomb).

$$\tilde{\varphi}(\bar{r}, R) = \Psi(\bar{r})g(R) \quad (2.3)$$

La ecuación de Schrödinger estacionaria en coordenadas \bar{r}_1, \bar{r}_2 es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + V(|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|) \right) \varphi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = E\varphi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \quad (2.4)$$

La expresion anterior bajo la transformacion (2.1) es

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m} \nabla_{\bar{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{4m} \nabla_{\bar{R}}^2 + V(|\bar{r}|) \right) \tilde{\varphi}(\bar{r}, \bar{R}) = E\tilde{\varphi}(\bar{r}, \bar{R}) \quad (2.5)$$

Reemplazando (2.3) en (2.5), obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{\nabla_{\bar{r}}^2 \Psi(\bar{r})}{\Psi(\bar{r})} - \frac{\hbar^2}{4m} \frac{\nabla_{\bar{R}}^2 g(R)}{g(R)} + V(|\bar{r}|) = E \quad (2.6)$$

Podemos observar en (2.6) dos expresiones que dependen de las variables independientes \bar{r} y R , es decir

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{\nabla_{\bar{r}}^2 \Psi(\bar{r})}{\Psi(\bar{r})} + V(|\bar{r}|) = E_{rel} \quad (2.7)$$

$$-\frac{\hbar^2}{4m} \frac{\nabla_{\bar{R}}^2 g(\bar{R})}{g(R)} = E - E_{rel} = E_{CM} \quad (2.8)$$

Una solución de (2.8) es

$$g(R) = Ae^{i\bar{K} \cdot \bar{R}}, \quad A = cte \quad (2.9)$$

donde

$$E_{CM} = \frac{\hbar^2 \bar{K}^2}{4m} \quad (2.10)$$

Debemos recordar que una partícula queda representada por un paquete de ondas, y no solamente por la función (2.9) que no es de cuadrado integrable.¹⁰ Sin embargo con (2.9) podemos formar el paquete de ondas que si es normalizable, es decir

$$\Phi(\bar{R}) = \int d^3\bar{K} G(\bar{K}) e^{i\bar{K} \cdot \bar{R}} \quad (2.11)$$

¹⁰Tener presente que estamos analizando el centro de masa.

Reescribamos la expresion (2.7):

$$-\frac{\hbar^2}{m} \nabla_{\vec{r}}^2 \Psi(\vec{r}) + V(|\vec{r}|) \Psi(\vec{r}) = E_{rel} \Psi(\vec{r}) \quad (2.12)$$

Debido a que el potencial solo depende de $|\vec{r}|$, la funcion de onda $\Psi(\vec{r})$ de la expresion (2.12) lo podemos expresar en variables esféricas separables, es decir

$$\Psi(\vec{r}) = \tilde{\Psi}(r) \Omega(\theta, \phi) \quad (2.13)$$

Escribamos (2.12) en coordenadas esféricas, obtenemos

$$-\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \Psi(\vec{r})) + \frac{\bar{L}^2}{mr^2} \Psi(\vec{r}) = (E_{rel} - V(|\vec{r}|)) \Psi(\vec{r}) \quad (2.14)$$

donde

$$\bar{L}^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1) \hbar^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (2.15)$$

$Y_{\ell m}$ corresponde a los armónicos esféricos. De acuerdo a la expresión (2.13), podemos identificar que $\Omega(\theta, \phi) = Y_{\ell m}(\theta, \phi)$.¹¹

Si nos limitamos al análisis del estado fundamental, entonces podemos tomar $\ell = 0$, $m = 0$. La ecuación (2.14) se transforma en

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \Psi(\vec{r})) = -\frac{m}{\hbar^2} (E_{rel} - V(|\vec{r}|)) \Psi(\vec{r}) \quad (2.16)$$

Como $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, entonces

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tilde{\Psi}(r) \quad (2.17)$$

Lamentablemente desconocemos la forma del potencial $V(|\vec{r}|)$ para poder hallar una solución de (2.16); sin embargo ahora sabemos que la función de onda del estado fundamental de dos electrones en interacción bajo un potencial efectivo $V(|\vec{r}|)$ sólo depende de $|\vec{r}| \equiv r$.

¹¹La parte angular corresponde a los armónicos esféricos, ya que estamos suponiendo un potencial central (prob. de dos cuerpos).

2.3 DESARROLLO DE FOURIER DE LA FUNCION DE ONDA DE UN PAR DE ELECTRONES $\Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$

El desarrollo de Fourier de $\varphi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$ en un volumen L^3 es¹²

$$\varphi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \frac{1}{L^3} \sum_{\bar{k}_1} \sum_{\bar{k}_2} \alpha(\bar{k}_1, \bar{k}_2) e^{i\bar{k}_1 \cdot \bar{r}_1 + i\bar{k}_2 \cdot \bar{r}_2} \quad (2.18)$$

Recordemos que en el caso continuo (en \bar{r}) tenemos

$$\frac{1}{L^3} \int e^{i\bar{k} \cdot \bar{r}} d^3\bar{r} = \delta_{\bar{k}}$$

y en el caso discreto (en \bar{k}) tenemos

$$\frac{1}{L^3} \sum_{\bar{k}} e^{i\bar{k} \cdot \bar{r}} = \delta_{\bar{r}}$$

podemos “despejar” $\alpha(\bar{k}_1, \bar{k}_2)$ de (2.18)

$$\alpha(\bar{k}_1, \bar{k}_2) = \frac{1}{L^3} \iint d^3\bar{r}_1 d^3\bar{r}_2 \varphi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) e^{-i\bar{k}_1 \cdot \bar{r}_1 - i\bar{k}_2 \cdot \bar{r}_2} \quad (2.19)$$

De (2.1), obtenemos

$$\begin{aligned} \bar{r}_1 &= \bar{R} + \frac{\bar{r}}{2} \\ \bar{r}_2 &= \bar{R} - \frac{\bar{r}}{2} \end{aligned} \quad (2.20)$$

La expresión (2.19) en las nuevas variables \bar{r} y R es¹³

$$\alpha(\bar{k}_1, \bar{k}_2) = \frac{1}{L^3} \int \int d^3\bar{r} d^3R \tilde{\varphi}(\bar{r}, R) e^{-i(\bar{k}_1 + \bar{k}_2) \cdot \bar{R}} e^{-i(\frac{\bar{k}_1 - \bar{k}_2}{2}) \cdot \bar{r}} \quad (2.21)$$

Reemplacemos (2.3) y (2.9) en (2.21), obtenemos

¹²Esto no es otra cosa que desarrollar la función Ψ como una combinación lineal de $e^{i\bar{k}_1 \cdot \bar{r}_1 + i\bar{k}_2 \cdot \bar{r}_2}$.

¹³El jacobiano de esta transformación es igual a uno.

$$\alpha(\bar{k}_1, \bar{k}_2) = \frac{1}{L^3} \int \int d^3\bar{r} d^3\bar{R} \Psi(\bar{r}) e^{-i(\bar{k}_1 + \bar{k}_2 - \bar{K}) \cdot \bar{R}} e^{-i\frac{(\bar{k}_1 - \bar{k}_2) \cdot \bar{r}}{2}} \quad (2.22)$$

En la expresión anterior podemos notar que

$$\frac{1}{L^3} \int d^3\bar{R} e^{-i(\bar{k}_1 + \bar{k}_2 - \bar{K}) \cdot \bar{R}} = \delta_{\bar{K}, \bar{k}_1 + \bar{k}_2} \quad (2.23)$$

Esta nueva expresión nos muestra la conservación del momentum del par. Ahora, si nos situamos en el centro de masa tenemos

$$\bar{K} = \bar{k}_1 + \bar{k}_2 = \bar{0} \quad (2.24)$$

entonces la expresión (2.22) toma la forma

$$\begin{aligned} \alpha(\bar{k}_1, \bar{k}_2) &= \int d^3\bar{r} \Psi(\bar{r}) e^{-i\frac{(\bar{k}_1 - \bar{k}_2) \cdot \bar{r}}{2}} \delta_{\bar{k}_2, -\bar{k}_1} \\ \tilde{\alpha}(\bar{k}_1) &= \sum_{\bar{k}_2} \alpha(\bar{k}_1, \bar{k}_2) = \int d^3\bar{r} \Psi(\bar{r}) \sum_{\bar{k}_2} e^{-i\frac{(\bar{k}_1 - \bar{k}_2) \cdot \bar{r}}{2}} \delta_{\bar{k}_2, -\bar{k}_1} \\ \tilde{\alpha}(\bar{k}_1) &= \int d^3\bar{r} \Psi(\bar{r}) e^{-i\bar{k}_1 \cdot \bar{r}} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Reemplazando (2.17) en (2.25), obtenemos

$$\tilde{\alpha}(\bar{k}_1) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int d^3\bar{r} \tilde{\Psi}(\bar{r}) e^{-i\bar{k}_1 \cdot \bar{r}} \quad (2.26)$$

De la expresión (2.26) podemos notar que $\tilde{\alpha}(\bar{k}_1)$ depende sólo del modulo de \bar{k}_1 , ya que podemos integrar las variables angulares (véase el Apéndice B). Esto representa la amplitud de probabilidad de encontrar un electrón de momentum $\hbar\bar{k}_1$ y el otro con momentum $-\hbar\bar{k}_1$. Es decir hemos agrupado los electrones en el espacio momentum en parejas interactuantes con momentum angular total casi igual a cero¹⁴(véase el gráfico 2.2) .

¹⁴Estos electrones todavía no están ligados.

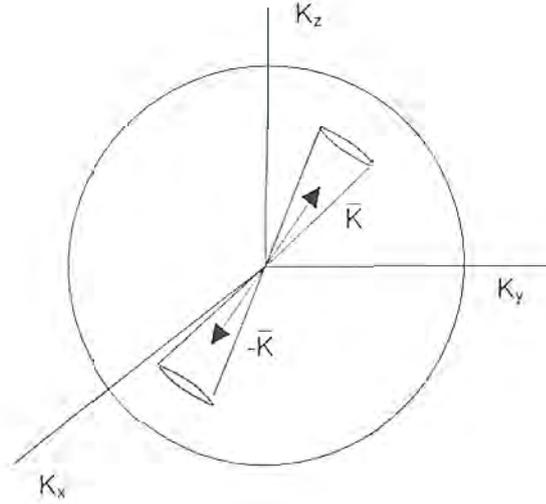


Figura 2-2: En el espacio momentum, los distintos \bar{k} están distribuidos de manera aleatoria de manera que para cada \bar{k} dentro de un pequeño ángulo sólido, siempre se puede encontrar un $-\bar{k}$ en otro pequeño ángulo sólido.

Despejando $\tilde{\Psi}(|\bar{r}|)$ de (2.26), obtenemos

$$\tilde{\Psi}(|\bar{r}|) = \frac{\sqrt{4\pi}}{L^3} \sum_{\bar{k}} \tilde{\alpha}(|\bar{k}|) e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} \quad (2.27)$$

Lo cual representa la función de onda del par de electrones¹⁵; que como se ve, sólo depende de la distancia entre dichos electrones. En la figura 2.3 damos una representación clásica de este agrupamiento de los electrones en \bar{r} .

2.4 SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN DE SCHRODINGER ESTACIONARIA EN COORDENADAS RELATIVAS

Escribamos otra vez (2.12)

$$-\frac{\hbar^2}{m} \nabla_{\bar{r}}^2 \Psi(\bar{r}) + V(|\bar{r}|) \Psi(\bar{r}) = E_{rel} \Psi(\bar{r}) \quad (2.28)$$

donde E_{rel} tiene una contribución debido a las energías cinéticas del par de electrones y otra debido a la interacción entre los electrones del par (E_{par}).

¹⁵Si nosotros distinguiésemos los electrones del par complementario veríamos que éstos estarían cambiando de electrones; pero no lo podríamos distinguir porque son partículas idénticas.

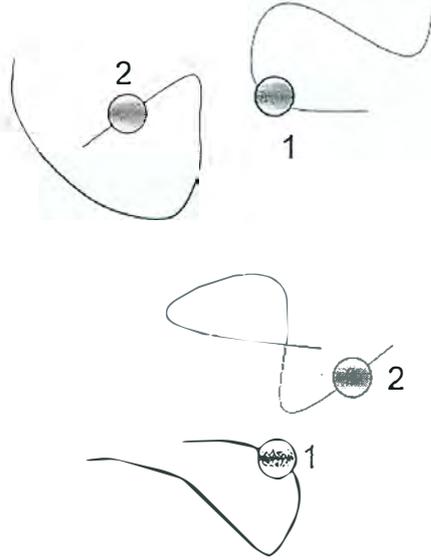


Figura 2-3: Representación clásica en \vec{r} de dos parejas de electrones con momentums opuestos en cierto instante. Las curvas representan las trayectorias de los electrones.

Debido a que las excitaciones en un gas de electrones ocurren en la vecindad del nivel de Fermi, debemos considerar al par de electrones - representado por la función de onda (2.27)- cercano al nivel de Fermi. Entonces podemos considerar

$$E_{rel} = E_{par} + \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} \quad (2.29)$$

Reemplacemos (2.27), (2.29) en (2.28):

$$-\frac{\hbar^2}{m} \nabla_{\vec{r}}^2 \tilde{\Psi}(r) + V(|\vec{r}|) \tilde{\Psi}(r) = (E_{par} + \frac{\hbar^2 k_F^2}{m}) \tilde{\Psi}(r) \quad (2.30)$$

Reemplazando (2.27) en (2.30) obtenemos

$$2\varepsilon_{\vec{k}} \tilde{\alpha}(|\vec{k}|) + \sum_{\vec{k}'} \gamma_{\vec{k}\vec{k}'} \tilde{\alpha}(|\vec{k}'|) = (E_{par} + 2\varepsilon_{\vec{k}_F}) \tilde{\alpha}(|\vec{k}|), \quad (2.31)$$

donde

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.32)$$

$\gamma_{kk'}$ es el coeficiente del desarrollo de Fourier de $V(|\bar{r}|)$, es decir,

$$\gamma_{kk'} = \frac{1}{L^3} \int d^3\bar{r} V(|\bar{r}|) e^{i(\bar{k}-\bar{k}')\cdot\bar{r}} \quad (2.33)$$

2.5 POTENCIAL EFECTIVO DE TIPO ATRACTIVO

Sea V_{ef} el potencial efectivo de interacción para un par de electrones,

$$V_{ef} = V_{e-red-e} + V_{e-e} \quad (2.34)$$

donde $V_{e-red-e}$ es el potencial de interacción electrón-red-electrón y V_{e-e} es el potencial de repulsión de Coulomb.

Para que V_{ef} sea de tipo atractivo, el potencial $V_{e-red-e}$ debe ser de tipo atractivo ya que V_{e-e} es de naturaleza repulsiva¹⁶. Es la interacción electrón-red-electrón la que crea las condiciones para el acoplamiento entre los electrones¹⁷.

Ahora vamos a considerar un potencial efectivo V_{ef} de manera que sus coeficientes de Fourier $\gamma_{kk'}$ cambien muy poco con \bar{k} y \bar{k}' , y que su valor sea no positivo, es decir

$$\gamma_{kk'} = -\frac{g}{L^3} \quad \text{para } \varepsilon_{\bar{k}_F} < \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m}, \frac{\hbar^2 \bar{k}'^2}{2m} < \varepsilon_{\bar{k}_F} + \hbar\omega_D \quad (2.35)$$

$$\gamma_{kk'} = 0 \quad \text{en otro caso} \quad (2.36)$$

Esta interacción es atractiva y constante en una banda de energía cuyo ancho es $\hbar\omega_D$ [5], ω_D es la frecuencia de Debye [6], sobre el nivel de Fermi. Reemplazando (2.35) en (2.31) obtenemos

$$(-2\varepsilon_{\bar{k}} + E + 2\varepsilon_{\bar{k}_F}) \tilde{\alpha}(|\bar{k}|) = w \quad (2.37)$$

donde

$$w \equiv -\frac{g}{L^3} \sum_{\bar{k}'} \tilde{\alpha}(|\bar{k}'|) \quad (2.38)$$

¹⁶Los electrones que forman pares ligados están muy separados en comparación a la longitud de penetración de London. Esto nos permite entender que la repulsión coulombiana sea despreciable.

¹⁷El resultado experimental, en superconductividad, conocido como el efecto isotópico nos permite entender el rol importante que juega la red de iones en la formación de pares de Cooper.

$$\varepsilon_{\bar{k}_F}^- < \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m} < \varepsilon_{\bar{k}_F}^- + \hbar\omega_D \quad (2.39)$$

De (2.37) y (2.38), obtenemos

$$1 = \frac{g}{L^3} \sum_{\bar{k}} \frac{1}{-E + 2\varepsilon_{\bar{k}} - 2\varepsilon_{\bar{k}_F}^-} \quad (2.40)$$

$$\varepsilon_{\bar{k}_F}^- < \varepsilon_{\bar{k}} = \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m} < \varepsilon_{\bar{k}_F}^- + \hbar\omega_D \quad (2.41)$$

2.6 ENERGÍA DE LIGADURA

Analicemos si existen valores propios $E < 0$ (pares ligados) en (2.40). Para esto, por comodidad, consideremos los valores de \bar{k} continuos, entonces podemos escribir

$$\frac{1}{L^3} \sum_{\bar{k}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\bar{k} \rightarrow \int N(\varepsilon) d\varepsilon \quad [6] \quad (2.42)$$

donde $N(\varepsilon)$ es el número de estados en el intervalo de energía ε y $\varepsilon + d\varepsilon$

Considerando (2.42) en (2.40) obtenemos

$$1 = g \int_{\varepsilon_{\bar{k}_F}^-}^{D+\varepsilon_{\bar{k}_F}^-} N(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{-E + 2\varepsilon_{\bar{k}} - 2\varepsilon_{\bar{k}_F}^-} \quad (2.43)$$

Como estamos considerando pares de electrones cuyos valores de energías no difieren mucho de la energía de Fermi, es razonable suponer que $D \ll \varepsilon_{\bar{k}_F}^-$, entonces como $N(\varepsilon)$ es una función continua podemos usar el teorema del punto intermedio; es decir podemos reemplazar $N(\varepsilon)$ por $N(\varepsilon_{\bar{k}_F}^-)$, donde $\varepsilon_{\bar{k}_F}^-$ puede ser considerado como el punto intermedio.

Hagamos el siguiente cambio de variable $u = 2\varepsilon_{\bar{k}} - E - 2\varepsilon_{\bar{k}_F}^- > 0$, entonces (2.43) se transforma en

$$\begin{aligned} 2 &= gN(\varepsilon_{\bar{k}_F}^-) \int_{-E}^{2D-E} \frac{du}{u} \Rightarrow \\ 2 &= gN(\varepsilon_{\bar{k}_F}^-) \ln u \Big|_{-E}^{2D-E} \Rightarrow \\ \frac{2D-E}{-E} &= e^{gN(\varepsilon_{\bar{k}_F}^-)} \end{aligned}$$

Si suponemos que la interacción atractiva entre los pares de electrones es bastante débil,

podemos escribir $gN(0) \ll 1$ [7]; entonces

$$E = -2D e^{gN(0)^{-2}} < 0 \quad (2.44)$$

sería el valor de la energía de ligadura del par.

2.7 MOMENTO ANGULAR INTRÍNSECO

Hasta ahora no hemos tomado en cuenta las variables de espín. La función de onda del par, teniendo en cuenta dichas variables, sería $\Phi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \sigma_1, \sigma_2)$, donde σ_1, σ_2 son las variables de espín. Recordemos que los electrones son fermiones, eso significa que Φ

$$\Phi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \Theta(\sigma_1, \sigma_2) \quad (2.45)$$

es una función antisimétrica¹⁸; como $\Psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$ debe ser simétrica, entonces la función de espín $\Theta(\sigma_1, \sigma_2)$ debe ser antisimétrica. Por lo tanto los pares de Cooper tienen un momentum angular intrínseco igual a cero.

2.8 CONCLUSIONES

1. Considerando la existencia de un potencial atractivo, mediado por la red, entre los electrones con momentum lineal cero y momentum angular intrínseco igual a cero se ha mostrado el proceso de condensación. de los electrones cercanos al nivel de Fermi.
2. Sólo los electrones cercanos al nivel de Fermi son los que forman pares de Cooper.
3. Se ha mostrado que el proceso de condensación de un gas de electrones en interacción ocurre en el espacio momentum. Además se ha encontrado un nuevo estado fundamental para el gas de electrones en interacción cuya energía es menor que la energía del estado fundamental del “Gas de Fermi”.

¹⁸Esta función se puede expresar como el producto de dos funciones debido a que el potencial considerado solo depende de las variables espaciales, además no existe un potencial que conecte las variables de espín con las variables espaciales.

Chapter 3

EL HAMILTONIANO BCS-GORKOV

3.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo y en el siguiente, en donde más que elaborar un modelo cuántico para explicar la superconductividad en metales, analizaremos la consistencia del modelo cuántico BCS-Gorkov planteado por G. Eilenberger [8]. En resumen podemos decir que el modelo BCS-Gorkov parte de un hamiltoniano, expresado en segunda cuantificación, que da cuenta de las interacciones entre los electrones vía la red (formación de pares de Cooper), después de plantear una serie asunciones se consigue simplificar el hamiltoniano inicial y se procede a elegir una base adecuada para diagonalizarlo con la finalidad de encontrar los estados propios y las energías correspondientes.

3.2 PROCESO DE CUANTIFICACIÓN

Consideremos un sistema “continuo” de electrones en interacción.

La energía de interacción entre las “partes componentes” del sistema, desde el punto de vista clásico esta dado por :

$$E_{int} = \int d^3\bar{r}_1 d^3\bar{r}_2 V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \rho(\bar{r}_1) \rho(\bar{r}_2) \quad (3.1)$$

donde :

$\rho(r)$ es la densidad electrónica

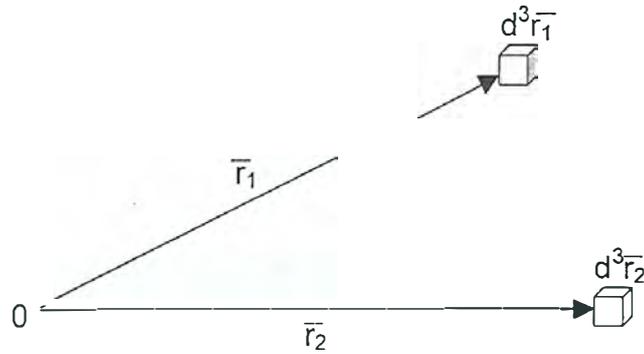


Figura 3-1:

$V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$ es el potencial de interacción entre los “diferenciales” de carga centradas en \bar{r}_1

Por otra parte tenemos, para obtener la expresión cuántica debemos considerar lo siguiente:

Expresión clásica \rightarrow Expresión cuántica

$$E_{int} \rightarrow \hat{H}_{int}$$

$$V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \rightarrow \hat{V}(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$$

Donde $\hat{V}(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$ es un operador multiplicativo.

Para obtener la correspondiente densidad de carga $\rho(r)$, veamos las dos leyes de conservación siguientes:

(a) $\nabla \cdot Y + \partial_t |\Psi|^2 = 0$ (Ley de conservación de la probabilidad)

(b) $\nabla \cdot y_e + \partial_t \rho_e = 0$ (Ley de conservación de la carga)

Y : densidad de corriente de probabilidad.

y_e : densidad de corriente, ρ_e : densidad de carga

Entonces se define

$$\begin{aligned}\rho_e &= e |\Psi|^2 \\ y_e &= eY\end{aligned}$$

Con lo cual tenemos la conexión entre la densidad electrónica ρ_e y la densidad de probabilidad $|\Psi|^2$, respetando las dos leyes de conservación [9].

Ahora, la expresión \hat{H}_{int} será:

$$\hat{H}_{int} = \int d^3\bar{r}_1 d^3\bar{r}_2 \hat{V}(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \Psi^*(r_1) \Psi(r_1) \Psi^*(r_2) \Psi(r_2)$$

Donde debe notarse que no importa el orden en que se escriban las funciones Ψ^* y Ψ , pero a la derecha de \hat{V} .

Usemos ahora el método de segunda cuantificación, entonces:

Funcion de onda \longrightarrow Operador

$$\Psi \longrightarrow \hat{\Psi}$$

$$\Psi^* \longrightarrow \hat{\Psi}^+$$

mientras que el operador $\hat{V}(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$ regresa a ser una simple función $V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$

La expresión H_{int} es:

$$\hat{H}_{int} = \int d^3\bar{r}_1 d^3\bar{r}_2 V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \hat{\Psi}^+(\bar{r}_1) \hat{\Psi}(\bar{r}_1) \hat{\Psi}^+(\bar{r}_2) \hat{\Psi}(\bar{r}_2)$$

Donde ahora si importa el orden en que deben ser escritos los operadores Ψ y Ψ^+ , aunque puede establecerse algún otro orden de acuerdo a las reglas de anticonmutación. Nótese que además \hat{H}_{int} es un operador debido a $\hat{\Psi}^+(\bar{r}_1) \hat{\Psi}(\bar{r}_1) \hat{\Psi}^+(\bar{r}_2) \hat{\Psi}(\bar{r}_2)$ y no a $V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$.

Hasta aquí hemos considerado los componentes espaciales; ahora tenemos en cuenta las

componentes de espín, tenemos:

$$\hat{H}_{int} = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \int d^3\bar{r}_1 d^3\bar{r}_2 V(\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \Psi_{\sigma_1}^{\dagger}(r_1) \Psi_{\sigma_1}(r_1) \Psi_{\sigma_2}^{\dagger}(r_2) \Psi_{\sigma_2}(r_2) \quad (3.2)$$

Nótese que hemos omitido el símbolo de operador (circunflejo) para hacer más fácil la escritura.

$\Psi_{\sigma}(\bar{r})$, $\Psi_{\sigma}^{\dagger}(\bar{r})$: Representan operadores de aniquilación y creación respectivamente de una partícula en \bar{r} y de componente σ de espín.

Podemos explicar el fenómeno de superconductividad suponiendo una interacción de tipo atractivo entre los electrones, basándonos en lo siguiente: El movimiento de los electrones, en la banda de conducción de un metal, a bajas temperaturas origina una polarización de la red cristalina la cual interactúa a su vez con los electrones, esta interacción es mas fuerte que la interacción coulombiana entre los electrones, que se encuentran “alejados” (ver Fig. 2.3). Dicho de otra manera, es la interacción electrón-fonón a bajas temperaturas lo que conduce a dicha interacción atractiva.

3.3 POTENCIAL DE INTERACCIÓN

Una de las principales asunciones del modelo BCS - Gorkov es considerar que el potencial de interacción tiene la siguiente forma

$$V(|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|) = -\frac{g}{2} \delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_2); \quad g > 0 \quad (3.3)$$

Esta expresión considera que las partículas interactuantes coinciden espacialmente; sin embargo es bien conocido que las partículas interactuantes (las que se acoplan para formar los llamados pares de Cooper) no coinciden espacialmente, están más alejadas que las partículas que no se acoplan; y la distancia media entre pares es relativamente más pequeña que el tamaño de un único par [10]. A pesar que la expresión (3.3) es aparentemente “contradictoria” permite encontrar resultados (temperatura crítica, capacidad calorífica, etc) muy similares a lo obtenido por el modelo BCS (original) [11], el cual permite explicar de una manera satisfactoria la superconductividad en los metales. Por ello lo aceptamos.

Como la expresión (3.3) obliga que las partículas en interacción coincidan espacialmente,

tenemos que aplicar el principio de Pauli, es decir las partículas que se acoplan deben tener espines opuestos.

Trataremos un sistema de N electrones, los cuales interactúan de a dos mediante (3.3). Reemplazando (3.3) en (3.2) y teniendo en cuenta el principio de Pauli, obtenemos

$$H_{int} = -g/2 \int d^3r \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) \Psi_{\downarrow}(\vec{r}) \Psi_{\uparrow}(\vec{r}) - g/2 \int d^3\vec{r} \Psi_{\downarrow}^{\dagger} \Psi_{\uparrow}^{\dagger} \Psi_{\uparrow} \Psi_{\downarrow} \quad (3.4)$$

Teniendo en cuenta las reglas de anticonmutación de los fermiones:

$$\begin{aligned} \{\Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}), \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r})\} &= 0 \\ \{\Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}), \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r})\} &= 0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

aplicando (3.5) en (3.4), obtenemos

$$H_{int} = -g \int d^3r \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r}) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) \Psi_{\downarrow}(\vec{r}) \Psi_{\uparrow}(\vec{r}) \quad (3.6)$$

El hamiltoniano H del sistema de N electrones con interacción es:

$$H = \sum_{\sigma} \int d^3\vec{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) h(\vec{r}) \Psi_{\sigma}(\vec{r}) + H_{int} \quad (3.7)$$

donde

$$h(\vec{r}) = P^2/2m + U(\vec{r})$$

Tomemos una base de ondas planas:

$$\Psi_{\sigma}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}\sigma} \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}) \implies \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} \exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r}) \quad (3.8)$$

Donde $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$

Lo primero que debe considerarse para obtener la expresión (3.8) es expresar la función de onda $\Psi_{\sigma}(\vec{r})$ en una base y luego pasar a la correspondiente expresión en segunda cuantificación.

Ahora $C_{\bar{k}\sigma}^+$ y $C_{\bar{k}\sigma}$ son operadores de creación y aniquilación de una partícula de momentum \bar{k} y componente σ de espín.

Reemplacemos (3.8) en (3.7), obtenemos

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{\bar{k}, \bar{k}', \sigma} C_{\bar{k}\sigma}^+ C_{\bar{k}'\sigma} \int d^3\bar{r} \exp(-i\bar{k}\cdot\bar{r}) h(\bar{r}) \exp(i\bar{k}'\cdot\bar{r}) \\
 & - g \sum_{\bar{k}, \bar{k}', \bar{k}'', \bar{k}'''} C_{\bar{k}\uparrow}^+ C_{\bar{k}'\downarrow}^+ C_{\bar{k}''\downarrow} C_{\bar{k}'''\uparrow} \int d^3\bar{r} \exp(i(\bar{k}'' + \bar{k}''' - \bar{k} - \bar{k}')\cdot\bar{r}) \quad (3.9)
 \end{aligned}$$

Sabemos que $h(r) = \frac{p^2}{2m} + U(r)$, donde $U(r)$ representa la interacción de un electrón con los núcleos. Como los electrones que interesan son los electrones de valencia, o sea los que se encuentran débilmente ligados al núcleo es justificable suponer $U(r) = -u = \text{cte} < 0$.

Entonces (3.9) toma la forma:

$$H = \sum_{\bar{k}, \sigma} \epsilon_{\bar{k}} C_{\bar{k}\sigma}^+ C_{\bar{k}\sigma} - g \sum C_{\bar{k}\uparrow}^+ C_{\bar{k}'\downarrow}^+ C_{\bar{k}''\downarrow} C_{\bar{k}'''\uparrow} \delta_{\bar{k}'' + \bar{k}''', \bar{k} + \bar{k}'} \quad (3.10)$$

donde $\epsilon_{\bar{k}} = \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m} - u = \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m^*}$, donde m^* representa a una masa efectiva de los electrones. Es decir podemos seguir considerando a nuestro sistema de electrones como un "gas de electrones" con masa efectiva m^* , en interacción mutua.

El segundo sumando de (3.10) nos muestra la conservación del momentum a través de la "función" delta:

$$\delta_{\bar{k} + \bar{k}', \bar{k}'' + \bar{k}'''}$$

3.4 PROMEDIO CUÁNTICO - ESTADÍSTICO DE UN OPERADOR

El segundo sumando de (3.10) es el producto de cuatro operadores cuyos dos subíndices k y k' son libres ya que k'' y k''' estarían determinados por la conservación del momentum y energía. Resulta sumamente complicado poder trabajar con este hamiltoniano por ser un hamiltoniano de muchas partículas, es preferible usar un método de aproximación con el cual podamos trabajar.

Consideraciones para justificar la aproximación:

- El sistema considerado se encuentra en equilibrio termodinámico.
- Estamos trabajando cerca de $T = 0K$, es decir el sistema de electrones se encuentra en su estado fundamental. Esto significa que las partículas que constituyen el sistema están condensados en su estado fundamental, entonces las fluctuaciones cuánticas en dicho estado son pequeñas y se puede reemplazar los operadores de creación o de aniquilación por su valor promedio (por ejemplo, si se reemplazan los operadores cuánticos de la luz por su valor promedio se obtienen las intensidades de campo de las ecuaciones de Maxwell).

Hagamos la siguiente aproximación:

$$g\Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r})\Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r})\Psi_{\downarrow}(\vec{r})\Psi_{\uparrow}(\vec{r}) \implies \Delta(\vec{r})\Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r})\Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) + \Delta^*(\vec{r})\Psi_{\downarrow}(\vec{r})\Psi_{\uparrow}(\vec{r}) - \frac{|\Delta(\vec{r})|^2}{g} \quad (3.11)$$

donde:

$$\Delta(\vec{r}) = g \langle (\Psi_{\downarrow}\Psi_{\uparrow})(\vec{r}) \rangle = g \frac{1}{Tr[e^{-\beta H_M}]} Tr \left[e^{-\beta H_M} (\Psi_{\downarrow}\Psi_{\uparrow})(\vec{r}) \right]$$

y

$$\Delta^*(\vec{r}) = g \langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r})\Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) \rangle$$

$\Delta(\vec{r})$ es un promedio estadístico. $\frac{|\Delta(\vec{r})|^2}{g}$ es una medida del error cometido al hacer la aproximación. Nótese que si tomamos el promedio a (3.11) obtenemos una relación consistente, lo cual nos permite confiar en nuestra aproximación.

Reemplazando (3.11) en (3.7), obtenemos:

$$H = \sum_{\sigma} \int d^3\vec{r} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r})h(\vec{r})\Psi_{\sigma}(\vec{r}) - \int d^3\vec{r} \left\{ \Delta(\vec{r})\Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r})\Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r}) + \Delta^*(\vec{r})\Psi_{\downarrow}(\vec{r})\Psi_{\uparrow}(\vec{r}) - \frac{|\Delta(\vec{r})|^2}{g} \right\} \quad (3.12)$$

Considerando Ψ en función de "ondas planas", como lo hemos hecho anteriormente y suponiendo en una primera aproximación $\Delta(\vec{r}) = \Delta = cte.$, entonces:

$$H = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} (C_{\vec{k}\uparrow}^+ C_{\vec{k}\uparrow} + C_{-\vec{k}\downarrow}^+ C_{-\vec{k}\downarrow}) - \sum \Delta C_{\vec{k}\uparrow}^+ C_{-\vec{k}\downarrow}^+ - \sum \Delta^* C_{-\vec{k}\downarrow} C_{\vec{k}\uparrow} + V \Delta^2 / g$$

$$H = V \frac{\Delta^2}{g} + \sum_{\vec{k}} H_{\vec{k}}$$

donde

$$H_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} (C_{\vec{k}\uparrow}^+ C_{\vec{k}\uparrow} + C_{-\vec{k}\downarrow}^+ C_{-\vec{k}\downarrow}) - \Delta C_{\vec{k}\uparrow}^+ C_{-\vec{k}\downarrow}^+ - \Delta^* C_{-\vec{k}\downarrow} C_{\vec{k}\uparrow}$$

Como H es un operador hermítico, entonces H_k debe ser hermítico.

3.5 DIAGONALIZACIÓN DE $H_{\vec{k}}$

Encontremos los estados propios de $H_{\vec{k}}$, para esto tomemos la siguiente base ortonormal:

- (a) $|\vec{k}\uparrow\rangle = C_{\vec{k}\uparrow}^+ |0\rangle$
- (b) $|\vec{k}\downarrow\rangle = C_{-\vec{k}\downarrow}^+ |0\rangle$
- (c) $|\vec{k}2\rangle = C_{\vec{k}\uparrow}^+ C_{-\vec{k}\downarrow}^+ |0\rangle$
- (d) $|\vec{k}0\rangle = |0\rangle$

$H_{\vec{k}}$ en esta base es:

$$H_{\vec{k}} = \begin{array}{cccc|c} (a) & (b) & (c) & (d) & \\ \epsilon_k & 0 & 0 & 0 & (a) \\ 0 & \epsilon_k & 0 & 0 & (b) \\ & 0 & \epsilon_k & -\Delta & (c) \\ 0 & 0 & -\Delta & 0 & (d) \end{array}$$

Los valores propios y correspondientes vectores propios son:

$$\epsilon_{\vec{k}\uparrow} = \epsilon_{\vec{k}} \text{-----} P_{\vec{k}\uparrow} |0\rangle = C_{\vec{k}\uparrow}^+ |0\rangle$$

$$\epsilon_{\vec{k}\downarrow} = \epsilon_{\vec{k}} \text{-----} P_{\vec{k}\downarrow} |0\rangle = C_{-\vec{k}\downarrow}^+ |0\rangle$$

$$\epsilon_{\bar{k}-} = \epsilon_{\bar{k}} - (\epsilon_{\bar{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2} \xrightarrow{P_{\bar{k}-}} |0\rangle = (\mu_{\bar{k}} + \nu_{\bar{k}} C_{\bar{k}\uparrow}^+ C_{-\bar{k}\downarrow}^+) |0\rangle$$

$$\epsilon_{\bar{k}+} = \epsilon_{\bar{k}} + (\epsilon_{\bar{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2} \xrightarrow{P_{\bar{k}+}} |0\rangle = (\nu_{\bar{k}} - \mu_{\bar{k}} C_{\bar{k}\uparrow}^+ C_{-\bar{k}\downarrow}^+) |0\rangle$$

donde

$$\mu_k = \left(\frac{1}{2} + \frac{\epsilon_k}{2} (\epsilon_k^2 + \Delta^2)^{-1/2} \right)^{1/2}$$

$$\nu_k = \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon_k}{2} (\epsilon_k^2 + \Delta^2)^{-1/2} \right)^{1/2}$$

Como los operadores H_k están definidos en subespacios diferentes, entonces un estado cualquiera de H estará dado por la suma directa de todos los estados.

Un estado propio $|Z\rangle$ del hamiltoniano H es

$$|Z\rangle = \prod_{\text{todos los } \bar{k}} P_{\bar{k}v} |0\rangle$$

donde para cada \bar{k} se escoge un $v = \uparrow, \downarrow, -, +$

La energía correspondiente al estado propio $|Z\rangle$ es

$$H|Z\rangle = V \left(\frac{\Delta^2}{g} + \frac{1}{V} \sum_{\bar{k}} \epsilon_{\bar{k}v} \right) |Z\rangle = E_Z |Z\rangle$$

3.6 CONCLUSIONES

1) Se ha mostrado, bajo la suposición de una interacción atractiva de corto alcance entre los electrones, el desdoblamiento de los niveles de energía en cada subespacio \bar{k} cercano al nivel de Fermi.

2) Los electrones que se acoplan tienen las siguientes características:

Momentum total = 0 y componente Z de espín = 0. A estos electrones acoplados se les llama pares de Cooper.

3) Como sabemos en un sistema formado por electrones, en el estado fundamental sólo puede haber un par de electrones de componente z de espín opuestos de acuerdo al principio de exclusión de Pauli; sin embargo en nuestro sistema de electrones con una interacción de alcance muy corto tenemos que en el estado fundamental pueden existir muchas parejas de electrones, formando cada par un par de Cooper debilmente ligado como se vé de acuerdo a los valores

propios de H_k , es decir ya no existe limitación en el número de partículas que pueden ocupar el estado fundamental, pudiendo producirse la “condensación”.

CAPÍTULO 4

CALCULO DE ALGUNAS MAGNITUDES MEDIBLES

En este capítulo encontraremos la temperatura crítica y la capacidad calorífica del sistema de electrones en el estado superconductor basándonos en el modelo planteado en el capítulo 3. Con tal objeto, en primer lugar, debemos calcular la energía libre de Helmholtz.

4.1 ENERGÍA LIBRE DE HELMHOLTZ

La energía libre de Helmholtz de un sistema cuántico de muchas partículas, caracterizado por su hamiltoniano H , está dado por:

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \left[e^{-\beta H} \right] \quad (4.1)$$

Para el sistema de electrones estudiado en el capítulo 3 tenemos que $H=H_M(\Delta)$ (véase (3.12)), entonces

$$F \equiv F(\Delta) = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \left[e^{-\beta H_M} \right] \quad (4.2)$$

Como H_M depende de Δ , veámos si imponiendo la condición de punto estacionario, es decir $\frac{\partial F}{\partial \Delta} = 0$,¹ obtenemos una expresión igual o parecida a la que habíamos supuesto para Δ .

¹F depende de una variable compleja Δ o Δ^* ; es decir, de dos variables reales.

$F(\Delta^* + s) = F(\Delta^*) + s \frac{\partial F}{\partial \Delta^*} + \frac{s^2}{2} \frac{\partial^2 F}{\partial \Delta^{*2}} + O(s^3)$; también se puede hacer el desarrollo con respecto a Δ .

Calculemos $\frac{\partial F}{\partial \Delta^*}$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \Delta^*} &= \frac{-1}{Tr[e^{-\beta H_M}] Tr \left[e^{-\beta H_M} \int d^3 \bar{r} \left(\Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow} - \frac{\Delta(\bar{r})}{g} \right) \right]} = \\ &= \int d^3 \bar{r} \frac{\Delta(\bar{r})}{g} - \frac{1}{Tr[e^{-\beta H_M}] Tr \left[e^{-\beta H_M} \int d^3 \bar{r} \Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow} \right]} \end{aligned} \quad (4.3)$$

Usando el Teorema del punto intermedio, (4.3) se transforma en

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \Delta^*} &= V \frac{\Delta(\bar{r}_{01})}{g} - \frac{1}{Tr[e^{-\beta H_M}] Tr \left[e^{-\beta H_M} (\Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow})(\bar{r}_{02}) \right]} \\ &= V \frac{\Delta(\bar{r}_{01})}{g} - V \langle (\Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow})(\bar{r}_{02}) \rangle \end{aligned}$$

donde \bar{r}_{01} y \bar{r}_{02} son puntos intermedios correspondientes al volumen de integración V .

Aplicamos la condición $\frac{\partial F}{\partial \Delta^*} = 0$ a la expresión anterior, obtenemos

$$\Delta(\bar{r}_{01}) = g \langle (\Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow})(\bar{r}_{02}) \rangle \quad (4.4)$$

(4.4) representa el promedio, usando el teorema del punto intermedio, de la función $\Delta(\bar{r})$ que habíamos supuesto en el capítulo 3.

$$\Delta(\bar{r}) = g \langle (\Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow})(\bar{r}) \rangle = g \frac{1}{Tr[e^{-\beta H_M}] Tr \left[e^{-\beta H_M} (\Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow})(\bar{r}) \right]}$$

Esto confirma que la suposición hecha en el capítulo 3 de representar el producto de dos operadores $(\Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow})(\bar{r})$ por su valor promedio cuántico - estadístico $\langle (\Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow})(\bar{r}) \rangle$, ha sido acertada.

Dediquémonos ahora a encontrar la expresión correspondiente a la energía libre del sistema que estamos estudiando. La función de partición es

$$Z(\Delta) = Tr \left[e^{-\beta H_M} \right] = e^{-\beta Tr(H_M)} = e^{-\beta E_S} \quad (4.5)$$

Si $\frac{\partial F}{\partial \Delta^*} = 0$ ó $\frac{\partial F}{\partial \Delta} = 0 \rightarrow F$ es estacionaria porque no cambia su valor en primer orden, sino recién en 2^{do} orden.

onde

$$E_S = V \frac{|\Delta|^2}{g} + \sum_{\bar{k}} \epsilon_{\bar{k}v}, \quad v = \uparrow, \downarrow, -, + \quad (4.6)$$

epresenta la energía correspondiente del estado $|s\rangle$.

Reemplazando (4.6) en (4.5), obtenemos

$$\begin{aligned} Z(\Delta) &= e^{-\beta V \frac{|\Delta|^2}{g}} \prod_{\bar{k}} \left(e^{-\beta \epsilon_{\bar{k}\uparrow}} + e^{-\beta \epsilon_{\bar{k}\downarrow}} + e^{-\beta \epsilon_{\bar{k}-}} + e^{-\beta \epsilon_{\bar{k}+}} \right) \\ &= e^{-\beta V \frac{|\Delta|^2}{g}} \prod_{\bar{k}} e^{-\beta \epsilon_{\bar{k}}} \left[2 + e^{-\beta(\epsilon_{\bar{k}}^2 + |\Delta|^2)^{1/2}} + e^{\beta(\epsilon_{\bar{k}}^2 + |\Delta|^2)^{1/2}} \right] \end{aligned}$$

Tomemos $\epsilon_{\bar{k}}$ relativo al potencial químico μ . Recordemos que a la temperatura $T = 0$ K, $\mu = \epsilon_F = \frac{\hbar^2 \bar{k}_F^2}{2m}$.

$$\epsilon_{\bar{k}} = \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m^*} - \mu$$

La función de partición de los electrones libres ($\Delta = 0$) está dado por

$$Z(0) = \prod_{\bar{k}} \left(1 + 2 e^{-\beta \epsilon_{\bar{k}}} + e^{-2\beta \epsilon_{\bar{k}}} \right)$$

entonces

$$\frac{Z(\Delta)}{Z(0)} = e^{-\beta V \frac{|\Delta|^2}{g}} \prod_{\bar{k}} \frac{\cosh^2 \frac{\beta}{2} (\epsilon_{\bar{k}}^2 + |\Delta|^2)^{1/2}}{\cosh^2 \frac{\beta}{2} \epsilon_{\bar{k}}} \quad (4.7)$$

entonces

$$F(\Delta) - F(0) = -\frac{1}{\beta} \ln \frac{Z(\Delta)}{Z(0)} = V \frac{|\Delta|^2}{g} - \frac{2}{\beta} \sum_{\bar{k}} \left[\ln \cosh \frac{\beta}{2} (\epsilon_{\bar{k}}^2 + |\Delta|^2)^{1/2} - \ln \cosh \frac{\beta}{2} \epsilon_{\bar{k}} \right] \quad (4.8)$$

Pasemos ahora del caso discreto \bar{k} al caso continuo \bar{k} , y luego cambiemos la variable \bar{k} por la variable de energía $\epsilon_{\bar{k}} = \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m^*} - \mu$.

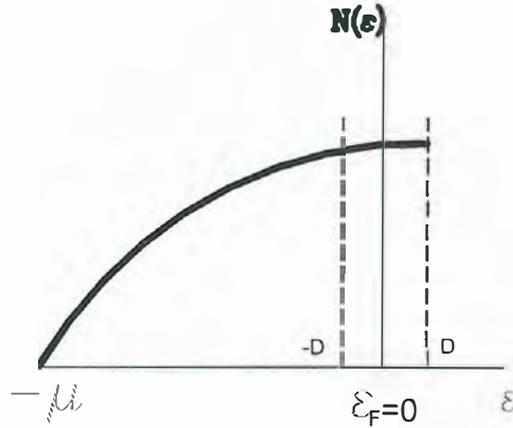


Figure 4-1: Densidad de estados disponibles versus la energía

$$\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} \rightarrow \int d\varepsilon N(\varepsilon) \quad (4.9)$$

Sea $N(\varepsilon)$ la densidad de estados de los electrones normales (véase la fig. 4.1). La variable de integración que debemos usar en (4.9) corresponde de $-\mu$ a ∞ . Como el fenómeno ocurre cerca al nivel de Fermi, basta considerar los límites de integración de $-D$ a D , donde $D = \hbar\omega_D$.²

Usemos el teorema del punto intermedio en la expresión integral (4.9), es decir

$$\int d\varepsilon N(\varepsilon) \rightarrow N(\varepsilon_1) \int d\varepsilon \quad (4.10)$$

donde ε_1 es punto intermedio de ε en la zona correspondiente a $-D < \varepsilon < D$. Del gráfico podemos notar que dicho punto intermedio es $\varepsilon_F = 0$.

Consideremos la expresión (4.10) en (4.8), obtenemos

$$F(\Delta) - F(0) = V \frac{|\Delta|^2}{g} - \left[\frac{2}{\beta} N(\varepsilon_F) \int d\varepsilon_{\vec{k}} (\ln \cosh \frac{\beta}{2} (\varepsilon_{\vec{k}}^2 + |\Delta|^2)^{1/2} - \ln \cosh \frac{\beta}{2} \varepsilon) \right] \quad (4.11)$$

La parte encerrada entre corchetes en (4.11), a la cual llamaremos I, se transforma en

²Esta es una de las principales suposiciones de este modelo.

$$\begin{aligned}
I &= \frac{2}{\beta} N(0) \left[\int d\varepsilon_{\vec{k}} \ln \cosh \frac{\beta}{2} (\varepsilon_{\vec{k}}^2 + |\Delta|^2)^{1/2} - \ln \cosh \frac{\beta}{2} \varepsilon \right] \\
&= \frac{2}{\beta} N(0) \int_{-D}^D d\varepsilon \ln \cosh \frac{\beta}{2} (\varepsilon^2 + |\Delta|^2)^{1/2} - \frac{2}{\beta} N(0) \int_{-D}^D d\varepsilon \ln \cosh \frac{\beta}{2} \varepsilon \quad (4.12)
\end{aligned}$$

donde $|\varepsilon| \leq D = \hbar\omega_D$.

sea

$$I_1(\Delta) = \frac{2}{\beta} N(0) \int_{-D}^D d\varepsilon \ln \cosh \frac{\beta}{2} (\varepsilon^2 + |\Delta|^2)^{1/2} \quad (4.13)$$

$$I = I_1(\Delta) - I_1(0) \quad (4.14)$$

→ (4.11) se transforma en

$$F(\Delta) - F(0) = V \frac{|\Delta|^2}{g} - I \quad (4.15)$$

Integremos por partes (4.13), obtenemos

$$\begin{aligned}
I_1(\Delta) &= \frac{2}{\beta} N(0) \int_{-D}^D d\varepsilon \ln \cosh \frac{\beta}{2} (\varepsilon^2 + |\Delta|^2)^{1/2} = \\
&\frac{2}{\beta} N(0) \varepsilon \ln \cosh \frac{\beta}{2} (\varepsilon^2 + |\Delta|^2)^{1/2} \Big|_{-D}^D \\
&\quad - N(0) \int_{-D}^D d\varepsilon \frac{\varepsilon}{(\varepsilon^2 + |\Delta|^2)^{1/2}} \tanh \frac{\beta}{2} (\varepsilon^2 + |\Delta|^2)^{1/2}
\end{aligned} \quad (4.16)$$

entonces

$$I_1(\Delta) = \frac{4D}{\beta} N(0) \ln \cosh \frac{\beta}{2} (\varepsilon^2 + |\Delta|^2) - N(0) \int_{-D}^D d\varepsilon \frac{\varepsilon}{(\varepsilon^2 + |\Delta|^2)^{1/2}} \tanh \frac{\beta}{2} (\varepsilon^2 + |\Delta|^2)^{1/2} \quad (4.17)$$

Calculemos la expresión integral de la expresión anterior, para esto recurramos al plano complejo, sea

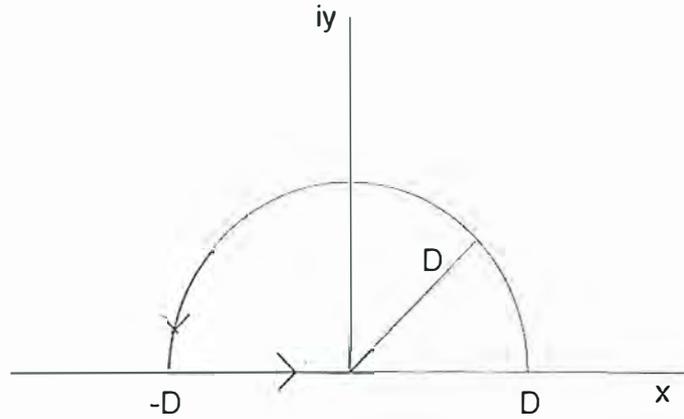


Figura 4-2: Región de integración en el plano complejo

$$\begin{aligned}
 I_2(\Delta) &= N(0) \int_{-D}^D d\varepsilon \frac{\varepsilon^2}{(\varepsilon^2 + |\Delta|^2)^{1/2}} \tanh \frac{\beta}{2} (\varepsilon^2 + |\Delta|^2)^{1/2} \\
 &= N(0) \oint dz \frac{z^2}{(z^2 + |\Delta|^2)^{1/2}} \tanh \frac{\beta}{2} (z^2 + |\Delta|^2)^{1/2} \\
 &= N(0) \oint dz \frac{z^2}{(z^2 + |\Delta|^2)^{1/2}} \tanh \frac{\beta}{2} (z^2 + |\Delta|^2)^{1/2} \quad (4.18)
 \end{aligned}$$

donde $z \in \mathbb{C}$.

La figura 4.2 muestra el camino de integración en el plano complejo.

Hagamos la siguiente transformación

$$s = \sqrt{z^2 + |\Delta|^2} \quad (4.19)$$

De acuerdo a la figura 4.3, tenemos que $z = x + iy$, $y > 0$, se encuentra definido de acuerdo a las siguientes expresiones

si

$$y > 0 \rightarrow |z| = D$$

si

$$y = 0 \rightarrow |z| \leq D$$

Considerando la transformación (4.19), la variable s debe cumplir las siguientes relaciones

si

$$-i \operatorname{Im}(z) > 0 \rightarrow |s|^4 = D^4 + |\Delta|^4 + 2 \operatorname{Re}(z^2) |\Delta|^2 \quad (4.20)$$

si

$$\operatorname{Im}(z) = 0 \rightarrow |s| \leq \sqrt{D^2 + |\Delta|^2} \quad (4.21)$$

Recordemos que $D = \hbar\omega_D = K_B\theta$, donde θ es la temperatura de Debye, y $|\Delta|$ es proporcional a T_c , siendo la constante de proporcionalidad $3.5K_B$ (véase [12]). Como $\theta \gg T_c$, entonces

$$D \gg |\Delta| \quad (4.22)$$

Bajo la condición (4.22). (4.20) y (4.21) se transforman en

$$si \quad -i \operatorname{Im}(z) > 0 \rightarrow |s| = D \quad (4.23)$$

$$si \quad \operatorname{Im}(z) = 0 \rightarrow |s| \leq D \quad (4.24)$$

De (4.19) tenemos

$$s ds = z dz$$

$$dz = \frac{s ds}{(s^2 - |\Delta|^2)^{1/2}}$$

Bajo la transformación (4.19), (4.18) es

$$I_2(\Delta) = N(0) \int_0^D (s^2 - |\Delta|^2)^{1/2} \tanh \frac{\beta}{2} s \, ds - N(0) \int_0^D (s^2 - |\Delta|^2)^{1/2} \tanh \frac{\beta}{2} s \, ds \quad (4.25)$$

como

$$\tanh \frac{\beta}{2} s = \frac{e^{\frac{\beta}{2}s} - e^{-\frac{\beta}{2}s}}{e^{\frac{\beta}{2}s} + e^{-\frac{\beta}{2}s}}$$

$$\tanh \frac{\beta}{2} s = \frac{e^{\beta s} - 1}{e^{\beta s} + 1}$$

Sea

$$f(s) = \frac{(s^2 - |\Delta|^2)^{1/2} (e^{\beta s} - 1)}{e^{\beta s} + 1}$$

Entonces, (4.25) se transforma en

$$I_2(\Delta) = N(0) \int ds f(s) - N(0) \int ds f(s) \quad (4.26)$$

calculemos

$$\oint ds f(s)$$

Los polos de $f(s)$ están dados por la sgte. ecuación:

$$e^{\beta s} + 1 = 0$$

$$s_l = \frac{(2l+1)\pi i}{\beta} \equiv w_l \quad (4.27)$$

donde i : unidad imaginaria.

De acuerdo al teorema de residuos, obtenemos

$$\oint f(s) ds = \frac{4\pi i}{\beta} \sum_l (s_l^2 - |\Delta|^2)^{1/2}$$

donde $l = 0, 1, 2, \dots, n$.

$$\oint f(s) ds = -\frac{4\pi}{\beta} \sum_{l=0}^n (w_l^2 + |\Delta|^2)^{1/2} \quad (4.28)$$

Reemplazando (4.28) en (4.26), obtenemos

$$I_2(\Delta) = -\frac{4\pi}{\beta} N(0) \sum_{l=0}^n (w_l^2 + \Delta^2)^{1/2} - N(0) \oint ds (s^2 - \Delta^2)^{1/2} \tanh \frac{\beta}{2} s \quad (4.29)$$

donde $l = 0, 1, 2, \dots, n$.

De (4.23) y (4.27)

$$\frac{2l_D + 1}{\beta} \pi = D \rightarrow n \equiv l_D = \left[\frac{D}{2\pi k_B T} - \frac{1}{2} \right] = \left[\frac{D}{2\pi k_B T} \right] \quad (4.30)$$

Reemplazando (4.29) en (4.17), obtenemos

$$I_1(\Delta) = \frac{4\pi}{\beta} N(0) \sum_{l=0}^n (w_l^2 + \Delta^2)^{1/2} + N(0) \int_0^D ds (s^2 - \Delta^2)^{1/2} \tanh \frac{\beta}{2} s + \frac{4D}{\beta} N(0) \ln \cosh \frac{\beta}{2} (D^2 + |\Delta|^2)^{1/2} \quad (4.31)$$

Reemplazando (4.31) en (4.14), obtenemos:

$$I = \frac{4\pi}{\beta} N(0) \sum_{l=0}^n \left((w_l^2 - |\Delta|^2)^{1/2} - w_l \right) + N(0) \int_0^D ds \left((s^2 - |\Delta|^2)^{1/2} - s \right) \tanh \frac{\beta}{2} s + \frac{4D}{\beta} N(0) \ln \left[\frac{\cosh \frac{\beta}{2} (D^2 + |\Delta|^2)^{1/2}}{\cosh \frac{\beta}{2} D} \right] \quad (4.32)$$

como $|\Delta| \ll D \rightarrow$ la \int y el último término de la expresión anterior son iguales a cero.

Reemplazando (4.32) en (4.15) obtenemos

$$\tau = \frac{F_\Delta - F_0}{V} = N(0) \left[\frac{\Delta^2}{gN(0)} - 4\pi K_B T \sum_{l=0}^n \left((w_l^2 + \Delta^2)^{1/2} - |w_l| \right) \right] \quad (4.33)$$

con $w_l = \pi K_B T (2l + 1)$; $l = 0, 1, 2, \dots, n$.

Encontremos Δ de acuerdo a la condición de punto estacionario

$$\frac{\partial \tau}{\partial \Delta} = 0 \quad (4.34)$$

$$\frac{\Delta}{gN(0)} = 2\pi K_B T \sum_{l=0}^n \frac{\Delta}{(w_l^2 + \Delta^2)^{1/2}} \quad (4.35)$$

(4.35) en (4.33):

$$\tau = -N(0) 2\pi K_B T \sum_{l=0}^n \frac{\left((w_l^2 + \Delta^2)^{1/2} - |w_l| \right)^2}{(w_l^2 + \Delta^2)^{1/2}} \quad (4.34)$$

$$\tau < 0$$

es decir el estado superconductor es estable (véase el Apéndice C).

4.2 TEMPERATURA CRÍTICA

La expresión integral (4.14) representa a una integral convergente, lo cual se puede apreciar fácilmente para pequeños valores de Δ . Recordemos que la deducción de (4.14) se hace en base a la aproximación $D \gg \Delta$, entonces sólo vamos a poder considerar algunos polos dentro nuestro camino de integración en el plano complejo de radio D (véase la figura 4-2). Entonces para una temperatura T , los valores de l que debemos considerar son los que cumplen la siguiente relación

$$0 \leq l \leq n = l_D(T) = \left[\frac{D}{2\pi K_B T} \right] \quad (4.35)$$

De (4.35) vemos que $\Delta = 0$ representa una solución.

Si $\Delta \neq 0$ y teniendo en cuenta (4.37), (4.35) se puede expresar en la forma

$$\frac{1}{gN(0)} = \sum_0^{l_D(T)} \left[\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 + \left(\frac{\Delta}{2\pi K_B T} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (4.36)$$

Elevando la temperatura T hasta T_c llegamos al estado normal, en donde, $\Delta \rightarrow 0$, entonces (4.38) toma la forma

$$\frac{1}{gN(0)} = \sum_0^{l_D(T_c)} \frac{1}{l + \frac{1}{2}} \quad (4.37)$$

Se puede despejar T_c sólo en caso de que exista acoplamiento débil, es decir $gN(0) \ll 1$, cual también significa $\frac{\pi K_B T_c}{D} \ll 1$, encontrándose

$$K_B T_c = \frac{4e^c}{2\pi} D e^{-\frac{1}{gN(0)}} = 1,14 D e^{-\frac{1}{gN(0)}} \quad (4.4)$$

donde c es la constante de Euler igual 0.5772. (4.40) se obtuvo con el programa Maple c

Scientific WorkPlace.

Tomando valores típicos para D y W_D de algunos materiales superconductores, tenemos $D = W_D \approx 100K_B K$ (K_B es la constante de Boltzman), $N(0)g \approx \frac{1}{3} \implies T_c < 10 K$.

Podríamos obtener un $T = 80K$, si tomamos $N(0)g = 1/3$ y $D = 1000K_B K$; pero esto no sería correcto, ya que g varía con la temperatura.

Tomando un valor límite cuando $T = T_c$, entonces el valor de g está condicionado al valor T_c , el cual está sujeto a la condición de acoplamiento débil.

Veamos cual es la relación de g con T_c , de (4.35) para el caso $\Delta \neq 0$ se obtiene

$$2\pi K_B T \sum_0^{l_D(T)} \frac{1}{(\Delta^2 + w_l^2)^{1/2}} - gN(0) = 0 \quad (4.41)$$

reemplazando (4.39) en (4.41), obtenemos:

$$2\pi K_B T \sum_0^{l_D(T)} \left[\frac{1}{(\Delta^2 + w_l^2)^{1/2}} - \frac{1}{w_l} \right] + \sum_{l_D(T_c)}^{l_D(T)} \frac{1}{l + \frac{1}{2}} = 0 \quad (4.42)$$

Imponiendo la condición de acoplamiento débil, tenemos que $l_D \rightarrow \infty$,³ entonces (4.42) toma la forma

$$2\pi K_B T \sum_{l=0}^{\infty} \left[\frac{1}{(\Delta^2 + w_l^2)^{1/2}} - \frac{1}{w_l} \right] + \ln \frac{T_c}{T} = 0 \quad (4.43)$$

Esta expresión nos garantiza la consistencia de obtener T_c a través de (4.39).

Teniendo en cuenta (4.35) y (4.43), obtenemos:

$$\frac{1}{g} = N(0) \left(2\pi K_B T \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{w_l} - \ln \frac{T_c}{T} \right) \quad (4.44)$$

Calculemos la variación de la energía libre de Helmholtz teniendo en cuenta la condición (4.43), obtenemos:

$$\tau = -N(0) \left[2\pi K_B T \sum_{l=0}^{\infty} \left(2(w_l^2 + \Delta^2)^{1/2} - 2w_l - \frac{\Delta^2}{w_l} \right) + \Delta^2 \ln \frac{T}{T_c} \right]$$

³Esto significa que en la región de integración mostrada en la figura 4.2 estamos considerando todos los polos.

$$\tau = -N(0) 2\pi K_B T \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\left((w_l^2 + \Delta^2)^{1/2} - w_l \right)^2}{(w_l^2 + \Delta^2)^{1/2}} < 0, \quad \Delta \neq 0 \quad (4.45)$$

4.3 CAPACIDAD CALORÍFICA

Ya hemos calculado la magnitud medible T_c . Una posterior e interesante magnitud es la capacidad calorífica. Sea C_{en} la capacidad calorífica de los electrones normales y C_{es} la capacidad calorífica de los electrones en el estado superconductor. De la Termodinámica sabemos

$$C_{es} - C_{en} = -T \frac{\partial^2 \tau}{\partial T^2} \quad (4.46)$$

donde τ es la densidad de energía libre de Helmholtz dada en (4.45) y T es la temperatura.

Sabemos que la capacidad calorífica para un gas de Fermi está dado por:

$$C_{en}(T) = \frac{2}{3} \pi^2 N(0) K_B^2 T \quad (4.47)$$

sea

$$t = \frac{T}{T_c} \quad \text{y} \quad \delta(T) = \Delta(T) / \pi K_B T \quad (4.48)$$

Discutamos C_{es} en las cercanías de T_c , entonces:

$$t = \frac{T}{T_c} \approx 1 \quad \text{y} \quad \delta(T) = \frac{\Delta(T)}{\pi K_B T} \ll 1 \quad (4.49)$$

Desarrollando τ en función de δ y $1 - t$, resulta:

$$\tau = (\pi K_B T)^2 N(0) \left((t-1) \delta^2 + \frac{b}{2} \delta^4 - \frac{c}{3} \delta^6 \right) \quad (4.50)$$

donde

$$b = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{(2l+1)^3} = 1.05 \quad (4.51)$$

$$c = \frac{3}{4} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{(2l+1)^5} = 0.753 \quad (4.52)$$

En el menor orden obtenemos para $\Delta^2(T)$

$$1 - t = b\delta^2 \quad y \quad \Delta^2(T) = \frac{1}{b} (\pi K_B T_c)^2 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \quad (4.53)$$

(4.53) en (4.50), obtenemos:

$$-\tau(T) = \frac{1}{b} (\pi K_B T_c)^2 N(0) \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2 \quad (4.54)$$

Para $T=T_c$, (4.54) y (4.46), obtenemos

$$\frac{C_{es} - C_{en}}{C_{en}} = \frac{3}{2b} = 1.43 \quad (4.55)$$

Este resultado no está muy alejado del valor obtenido en el modelo BCS, el cual reporta un valor igual a 1.52. El valor experimental se encuentra entre 1.52 y 2.00.

4.4 CONCLUSIONES

De (4.45) podemos afirmar que el estado superconductor es estable comparado con el estado normal, entonces la existencia de una pequeña interacción de tipo atractiva entre los electrones, cuando la muestra se encuentra por debajo de la temperatura crítica, origina una nueva estructura de niveles, con el consiguiente nuevo estado fundamental con energía menor que el estado inicial.

El resultado obtenido en (4.55) nos permite confiar en el modelo BCS-Gorkov, ya que dicho resultado no está muy alejado del valor experimental ni del valor obtenido por la teoría BCS. Además debemos mencionar que el salto en la capacidad calorífica es una característica de una transición de fase de segundo orden.

NOTA: Los capítulos 2, 3 y 4 se han hecho en base al artículo Modelo "BCS - Gorkov" de G. Eilenberger. Cabe señalar que hemos encontrado algunos errores en dicho artículo. Errores que han sido corregidos, y que los menciono en el apéndice D.

• APÉNDICE A

Veamos a que debe ser igual f para que la expresión (1.35) sea consistente con las ecuaciones de Maxwell, para lograr esto juntemos las ecuaciones (1.29) y (1.35) en forma de un tensor antisimétrico:

$$\Gamma \left(\frac{\partial j_i}{\partial x_k} - \frac{\partial j_k}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{c} F_{ik} \quad (A1)$$

Representaremos $E_x, E_y, E_z, B_x, B_y, B_z$ por $iF_{14}, iF_{24}, iF_{34}, \frac{F_{23}}{c}, \frac{F_{31}}{c}, \frac{F_{12}}{c}$. Las coordenadas x, y, z, ict las reemplazaremos por x_1, x_2, x_3, x_4 . La componente $j_4 = \frac{f}{ic\Gamma} = ic\rho$, como podemos observar relaciona f con ρ .

Verifiquemos que (1.35) se puede expresar por (A1). De (A1) tenemos que:

$$\begin{aligned} \Gamma \left(\frac{\partial j_1}{\partial x_4} - \frac{\partial j_4}{\partial x_1} \right) &= \frac{1}{c} F_{14} \rightarrow \Gamma \left(\frac{\partial j_1}{\partial ict} - \left(\frac{1}{ic\Gamma} \right) \frac{\partial f}{\partial x} \right) = \frac{1}{c} \frac{E_x}{i} \\ \Gamma \left(\frac{\partial j_2}{\partial x_4} - \frac{\partial j_4}{\partial x_2} \right) &= \frac{1}{c} F_{24} \rightarrow \Gamma \left(\frac{\partial j_2}{\partial ict} - \left(\frac{1}{ic\Gamma} \right) \frac{\partial f}{\partial y} \right) = \frac{1}{c} \frac{E_y}{i} \\ \Gamma \left(\frac{\partial j_3}{\partial x_4} - \frac{\partial j_4}{\partial x_3} \right) &= \frac{1}{c} F_{34} \rightarrow \Gamma \left(\frac{\partial j_3}{\partial ict} - \left(\frac{1}{ic\Gamma} \right) \frac{\partial f}{\partial z} \right) = \frac{1}{c} \frac{E_z}{i} \end{aligned}$$

Lo cual nos da

$$\Gamma \left(\partial_t \bar{J}_s - \frac{1}{\Gamma} \nabla (-c^2 \Gamma \rho) \right) = \bar{E} \quad (A2)$$

De la relación de la componente J_4 tenemos que $f = -c^2 \Gamma \rho$, entonces en (A2); obtenemos:

$$\Gamma (\partial_t \bar{J}_s + c^2 \nabla \rho) = \bar{E}$$

Verifiquemos que (1.29) se puede expresar por (A1). De (A1) tenemos que:

$$\begin{aligned} \Gamma \left(\frac{\partial j_2}{\partial x_3} - \frac{\partial j_3}{\partial x_2} \right) &= \frac{1}{c} F_{23} \rightarrow \Gamma \left(\frac{\partial j_2}{\partial z} - \frac{\partial j_3}{\partial y} \right) = B_x \\ \Gamma \left(\frac{\partial j_3}{\partial x_1} - \frac{\partial j_1}{\partial x_3} \right) &= \frac{1}{c} F_{31} \rightarrow \Gamma \left(\frac{\partial j_3}{\partial x} - \frac{\partial j_1}{\partial z} \right) = B_y \\ \Gamma \left(\frac{\partial j_1}{\partial x_2} - \frac{\partial j_2}{\partial x_1} \right) &= \frac{1}{c} F_{12} \rightarrow \Gamma \left(\frac{\partial j_1}{\partial y} - \frac{\partial j_2}{\partial x} \right) = B_z \end{aligned}$$

lo cual representa (1.29).

• APÉNDICE B

$$\begin{aligned}
 \int d^3\vec{r} \tilde{\Psi}(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} &= \int d^3\vec{r} \tilde{\Psi}(r) e^{-ikr \cos \theta} = \int r^2 (d\phi \sin \theta d\theta) dr \tilde{\Psi}(r) e^{-ikr \cos \theta} \\
 &= 2\pi \int dr r^2 \tilde{\Psi}(r) \int_0^\pi \pi d\theta \sin \theta e^{-ikr \cos \theta} = \frac{2\pi}{ik} \int dr r \tilde{\Psi}(r) \int_0^\pi \pi d\theta \frac{d}{d\theta} e^{-ikr \cos \theta} \\
 &= \frac{2\pi}{ik} \int dr r \tilde{\Psi}(r) (e^{-ikr \cos \theta}) \Big|_0^\pi = \frac{4\pi}{k} \int dr r \tilde{\Psi}(r) \sin kr = F(k).
 \end{aligned}$$

• APÉNDICE C

De la primera ley de la termodinámica, tenemos:

$$dE = dQ + dW \quad (C1)$$

Teniendo en cuenta que

$$dS \geq dQ/T \quad (C2)$$

donde la igualdad corresponde a procesos reversibles y la desigualdad a procesos irreversibles.

$-dW$ corresponde al trabajo realizado sobre el sistema debido a una acción externa.

$$dW = PdV + YdX \quad (C3)$$

"Y" corresponde a alguna acción externa aparte de la presión.

(C2),(C3) en (C1):

$$dE \leq TdS + PdV + YdX \quad (C4)$$

Sumando y restando SdT en el lado derecho de (C4), obtenemos:

$$dE \leq TdS + SdT + PdV + YdX - SdT$$

$$dE \leq d(ST) + PdV + YdX - SdT$$

$$d(E - ST) \leq PdV + YdX - SdT$$

definamos $F \equiv E - ST \implies$

$$dF \leq PdV + YdX - SdT \quad (C5)$$

En el equilibrio:

$$dF = PdV - SdT + YdX \implies F = F(V, T, X) \implies P = -(\partial F / \partial V)_{T, X} \quad y \quad S = -(\partial F / \partial T)_{V, X}$$

$$\text{Si } Y = 0 \implies (\partial F / \partial X)_{V, T} = 0$$

De (C5), si V, T, X son constantes $\implies dF \leq 0 \implies$ un estado de equilibrio a V, T, X constantes corresponde a un estado de mínima energía libre de Hemholtz.

• APÉNDICE D

1. En el artículo original[8] la expresión (2.27) se usa directamente; pero esta función de onda para dos partículas no es tan evidente. En el presente trabajo hacemos la deducción de (2.27) en forma clara y convincente.

2. Para encontrar la expresión (4.4), en el artículo original se usa la condición de minimización de $F(\Delta)$; sin embargo esa condición no puede ser usada ya que no se especifica que Δ sea real. En el presente trabajo se usa la condición de punto estacionario.

4. La expresión integral en (4.11) es presentada en el artículo original como una integral convergente, en general no lo es. En el presente trabajo se encontró que la condición de convergencia se cumple si $D \gg |\Delta|$.

3. La condición 4.22 ($D \gg |\Delta|$) no está especificada claramente en el artículo original. En el presente trabajo se hace una fundamentación adecuada.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] H. K. Onnes, Comm. Phys. Lab., Univ. Leyden, Nos. 119, 120, 122 (1911).
- [2] Meissner and Ochsenfeld, 'Naturw.', **21**, p. 787(1933).
- [3] J. Jackson, Classical Electrodynamics, John Wiley & Sons, Inc., p. 177, Chap. 6; p. 225, Chap. 7. New York. London (1963).
- [4] F. and H. London, Clarendon Laboratory, Oxford. The Electromagnetic Equations of the Supraconductor (communicated by F.A. Lindermann, F.R.S.- Received October 23, 1934).
- [5] Tord Claeson and Stig Lundqvist, The Microscopic Theory of Superconductivity-verifications and Extensions, Physica Scripta. vol. 10, 1974.
- [6] Charles Kittel. Introducción a la Física del estado sólido(3ª edición),cap. 5, p. 128, 134. 1993.
- [7] P.G. DE GENNES, Superconductivity of metals and Alloys, Chap. 4. p. 95. 1966.
- [8] G. Eilenberger. Supraleitung und Verwandte Quantenphanomene. Institut fur Festkorperforschung (29, February - 11, Marz 1988).
- [9] Apuntes del curso de mecánica cuántica del Prof. H. Valqui. F.C. - UNI.
- [10] R. Feynman. Mecánica Cuántica. Vol III. 21 - 10.
- [11] J. Bardeen, L.N. Cooper y J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175(1957).
- [12] R.G. Scurlock, Low Temperature Behaviour of Solids, p. 20, 82. 1966.
- [13] Graham P. Collins, Scientific American, Volume 284 - Number 6, p.14, June 2001.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] H. K. Onnes, Comm. Phys. Lab., Univ. Leyden, Nos. 119, 120, 122 (1911).
- [2] Meissner and Ochsenfeld, 'Naturw.', **21**, p. 787(1933).
- [3] J. Jackson, Classical Electrodynamics, John Wiley & Sons, Inc., p. 177, Chap. 6; p. 225, Chap. 7. New York. London (1963).
- [4] F. and H. London, Clarendon Laboratory, Oxford. The Electromagnetic Equations of the Superconductor (communicated by F.A. Lindermann, F.R.S.- Received October 23, 1934).
- [5] Tord Claesson and Stig Lundqvist, The Microscopic Theory of Superconductivity-verifications and Extensions, Physica Scripta. vol. 10, 1974.
- [6] Charles Kittel. Introducción a la Física del estado sólido(3ª edición),cap. 5, p. 128, 134. 1993.
- [7] P.G. DE GENNES, Superconductivity of metals and Alloys, Chap. 4. p. 95. 1966.
- [8] G. Eilenberger. Supraleitung und Verwandte Quantenphänomene. Institut für Festkörperforschung (29, February - 11, März 1988).
- [9] Apuntes del curso de mecánica cuántica del Prof. H. Valqui. F.C. - UNI.
- [10] R. Feynman. Mecánica Cuántica. Vol III. 21 - 10.
- [11] J. Bardeen, L.N. Cooper y J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175(1957).
- [12] R.G. Scurlock, Low Temperature Behaviour of Solids, p. 20, 82. 1966.
- [13] Graham P. Collins, Scientific American, Volume 284 - Number 6, p.14, June 2001.

New Trick from Old Dog

A MAGNESIUM COMPOUND IS A STARTLING SUPERCONDUCTOR BY GRAHAM P. COLLINS

You can buy magnesium boride ready-made from chemical suppliers as a black powder. The compound has been known since the 1950s and has typically been used as a reagent in chemical reactions. But until this year no one knew that at 39 degrees above absolute zero it conducts electric current perfectly—it is a superconductor. Although its superconducting temperature is far below that of the copper oxide high-temperature superconductors, the compound has set off a flurry of excited activity among researchers. Magnesium boride overturned theorists' expectations and promises technological applications.

Jun Akimitsu of Aoyama-Gakuin University in Tokyo announced the surprising discovery at a conference in Japan on January 10, after he and his co-workers stumbled on magnesium boride's properties while trying to make more complicated materials involving magnesium and boron. Word of the discovery sped around the world by e-mail, and in three weeks the first research papers by other groups were posted on the Internet. In early March a special session on magnesium boride was hastily put together in Seattle at the American Physical Society's largest annual conference: from 8 P.M. until long after midnight, nearly 80 researchers presented ultrabrief summaries of their results.

Until January standard wisdom ruled out the possibility of a conventional superconductor operating above about 30 kelvins. Conventional superconductors are understood by the so-called BCS theory, formulated in 1957. The magnesium boride result seemed to imply that either a new superconducting mechanism had been discovered or that the BCS theory needed to be revised.

Almost all the experimental evidence so far supports the idea that magnesium boride is a standard BCS superconductor, unlike the copper oxides. For example, when researchers use the isotope boron 10 in place of boron 11, the

material's critical temperature rises slightly, as expected, because the lighter isotope alters vibrations of the material's lattice of atoms, a key component of BCS theory. How, then, has the magic 30 kelvins been exceeded? "Those predictions were premature," says Robert Cava of Princeton University, with 20/20 hindsight. Magnesium boride has a combination of low-mass atoms and favorable electron states that was overlooked as a possibility.

Physicists are trying to push the BCS limit even further to produce higher critical temperatures by doping the material with carefully selected impurities. Groups have added aluminum or carbon (neighbors of boron in the periodic table), but these both decrease the critical temperature. Calcium is expected to work better, but no one has succeeded in producing calcium-doped magnesium boride. "It's like Murphy's Law," Cava gripes.

Even undoped, magnesium boride has several attractive features for applications. First, the higher operating temperature would allow cooling of the superconductor by refrigeration instead of by expensive liquid helium, as is needed for the most widely used superconductors. The high-temperature copper oxide superconductors beat magnesium boride hands-down on that count, but they have proved difficult to manufacture into

convenient wires. Also, the supercurrent does not flow well across the boundaries of microscopic grains in copper oxides.

Magnesium boride, in contrast, has already been fashioned into wires using simple techniques, and the supercurrent flows effortlessly between grains. One drawback, however, is that magnesium boride loses its superconductivity in relatively weak magnetic fields, fields that are inescapable in applications. But with the progress seen already in a scant few months, and with many tricks still up their sleeves, researchers are confident they can overcome such problems.



MAGNETIC FLUX at low levels, seen here penetrating a film of magnesium boride, destroys the material's superconductivity.

WHAT TO KNOW: GETTING HIGH

The high-temperature superconductor mercury-barium-calcium copper oxide superconducts below 164 kelvins—but only when it is subjected to tremendous pressure, more than 10,000 atmospheres. At ordinary atmospheric pressure the record temperature is held by the same substance, but at 138 kelvins. Hints of room-temperature superconductivity have often emerged over the years, but none of the claimed results has been successfully reproduced. Recently some press reports have made such claims by a group at the University of Zagreb in Croatia, but superconductivity experts have concluded that those results have no merit. Some researchers, such as sightings of reproducible, anomalously high superconducting temperatures are known as USOs, for unidentified superconducting objects.