

UNIVERSIDAD DE LOS ANDES

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA



IMPUREZAS NO MAGNÉTICAS EN UN SUPERCONDUCTOR NO CONVENCIONAL EN ESTADO TRIPLETE

Tesis de Grado

Presentado ante la Ilustre Universidad de Los Andes

Para Optar al Título de

LICENCIADO EN FÍSICA

Presentado Por

BR. ENDER ALCIDES OCHOA MOLINA

Tutor: DR. PEDRO CONTRERAS

Mérida, Mayo 2014

Resumen

Se ha revisado brevemente el estudio teórico de las funciones de Green en superconductores no convencionales, al cual se le llama el formalismo de Gorkov. Dicho estudio ha permitido encontrar el cálculo numérico de la brecha de energía y la densidad de estados para un superconductor en estado triplete. La energía del superconductor se renormaliza, para considerar los efectos de las impurezas no magnéticas en una aproximación de enlace fuerte para una red cuadrada y tomando en cuenta solo la interacción de los primeros vecinos de dicha red.

Índice general

1. Introducción	7
1.1. Superconductividad	9
1.1.1. Superconductividad Convencional	13
1.1.2. Superconductividad No Convencional	14
1.2. Estado con paridad Triplete	15
2. Fundamentos Teóricos	16
2.1. Energía de un Superconductor en estado normal para una red cuadrada	16
2.2. Pares de Cooper para un estado triplete	21
2.3. Parámetro de orden triplete en una red cuadrada	24
2.4. Formalismo de Gorkov	27
3. Efecto de las impurezas en la superconductividad no convencional	30
3.1. Impurezas no magnéticas en un metal normal (Técnica de S. Edwards)	31
3.2. Formalismo de la auto-energía renormalizada por la presencia de im- purezas no magnéticas para un superconductor no convencional . . .	33
3.2.1. Límites de la matriz de dispersión por impurezas no magnéticas	36
3.2.2. Ecuación trascendental para la dispersión de impurezas a cero frecuencia	37
3.3. Densidad de Estados	38
3.3.1. Densidad Residual de estados	39
3.4. Brecha de Energía Superconductora	40
4. Resultados	46
Conclusiones	57

Apéndice A	59
-------------------	-----------

Apéndice B	61
-------------------	-----------

Índice de figuras

1.1. Evolución de la Temperatura crítica.	8
1.2. El fenómeno de la superconductividad, para el caso del mercurio . . .	9
1.3. Diagrama de Argand para el Parámetro de orden.	12
1.4. Interacción electrón-fonón-electrón	14
2.1. Red Cuadrada en el modelo de tight-binding	17
2.2. Energía del estado normal	18
2.3. Superficies de Fermi para diversos estados en la primera zona de Bri- llouin.	20
2.4. Superficie de Fermi para un Superconductor en estado Triplete en la primera zona de Brillouin.	20
2.5. Par de Cooper	22
2.6. Brecha superconductora bidimensional como función del espacio recípro- co, para un modelo extendido de la primera zona de Brillouin.	27
2.7. Diagrama de Feynman de la función de Green normal descamisada . .	28
2.8. Diagrama de Feynman de la función de Green normal encamisada . .	28
2.9. Diagrama de Feynman de la función de Green anómala encamisada .	28
2.10. Expansión de los diagramas de Feynman para las Funciones de Green F y G	28
3.1. Diagrama de Feynman para la función de Green encamisada y pro- mediada por impurezas no magnéticas	32
3.2. Diagrama de Feynman para la auto-energía renormalizada por impu- rezas no magnéticas	32
3.3. Diagrama de Feynman para la Brecha de Energía Superconductora .	41

4.1. Tiempo de vida medio del par de Cooper en función de la energía del superconductor	47
4.2. $\mathbf{Im}(\tilde{\omega})$ vs ω/Δ_0 para el límite unitario.	48
4.3. $\mathbf{Im}(\tilde{\omega})$ vs ω/Δ_0 para $c = 0,2$	49
4.4. $\mathbf{Im}(\tilde{\omega})$ vs ω/Δ_0 para $c = 0,4$	49
4.5. γ como función del parámetro de dispersión c	50
4.6. Densidad de estados para $c = 0,0$	51
4.7. Densidad de estados para $c = 0,2$	52
4.8. Densidad de estados para $c = 0,4$	52
4.9. Temperatura de transición en función de la densidad residual de estados.	53
4.10. $\Delta_0(T)$ vs T para $c = 0,0$	54
4.11. $\Delta_0(T)$ vs T para $c = 0,3$	55
4.12. $\Delta_0(T)$ vs T normalizadas en T_c para $c = 0,0$	56
4.13. $\Delta_0(T)$ vs T normalizadas en T_c para $c = 0,3$	56

Capítulo 1

Introducción

Para 1911, tres años después de la licuefacción¹ del helio He , el físico Holandés Heike Kamerlingh Onnes encontró que la resistencia eléctrica del Mercurio Hg decrecía de forma abrupta hasta alcanzar un valor nulo cuando se enfriaba la muestra por debajo de 4.15 Kelvin [1]. Es así, como el descubrimiento de la conductividad eléctrica perfecta o la pérdida total de la resistencia eléctrica de un material se le denominó superconductividad.

Desde entonces se han encontrado experimentalmente una serie de propiedades del estado superconductor. Vale la pena destacar primeramente que en 1933, los físicos Walter Meissner y Robert Ochsenfeld [2] observaron que el estado superconductor era un fenómeno físico que iba más allá que la pérdida de la resistencia eléctrica. Cuando se enfría el superconductor bajo campos magnéticos moderados, éste expulsa el campo al disminuir la temperatura por debajo de la temperatura de transición, lo que significaba que un superconductor actúa como un material diamagnético perfecto². Sin embargo, a pesar de toda una serie de descubrimientos experimentales, la pregunta sobre la causa que origina la superconductividad atormentaba a los científicos teóricos. En 1935, los hermanos London [3] y en 1950, Vitaly Ginzburg y Lev Landau [4] desarrollaron teorías fenomenológicas que explicaban el fenómeno de la superconductividad. Para 1957, apareció la teoría microscópica o BCS [5] (denomina-

¹Licuefacción: cambio de estado que ocurre cuando una sustancia pasa del estado gaseoso al líquido, por disminución de la temperatura y el aumento de presión.

²Diamagnetismo: propiedad de los materiales que consiste en repeler los campos magnéticos externos.

da así por los nombres de sus creadores: John Bardeen, Leon Cooper y John Schiffer) que descifraba el principio fundamental de la superconductividad. Ahora se conoce que, en los superconductores, los electrones de conducción forman pares de Cooper³. La superconductividad se trata de un fenómeno general que aparece en materiales muy diversos. Podemos encontrar superconductores entre los materiales amorfos y cristalinos. En ellos la superconductividad puede coexistir con otros ordenamientos de carga y espín. El año 1986, fue muy importante en la historia de la superconductividad, debido a los descubrimientos que hicieron los investigadores de IBM Zúrich (Suiza) sobre superconductores con temperaturas críticas muy altas, del orden de 34 K a 92 K [6]. Estos descubrimientos cuestionan la legitimidad de la teoría BCS. Es por eso que la coexistencia del estado superconductor y su interacción con diferentes ordenamientos atómicos, electrónicos o magnéticos en muchos casos sigue aún sin ser explicada.

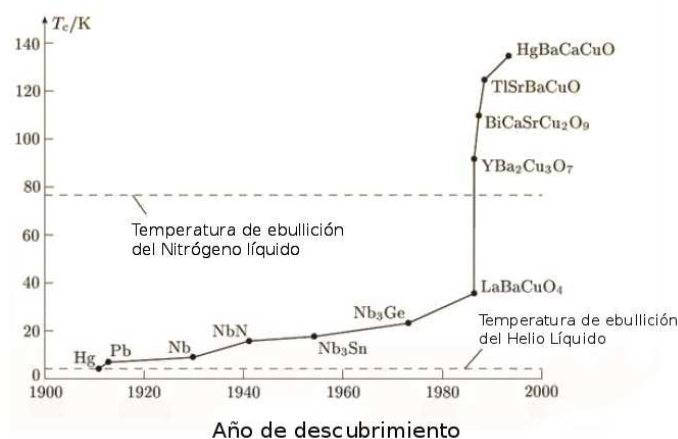


Figura 1.1: Evolución de la Temperatura crítica.

Es así, como un siglo después del descubrimiento de la superconductividad, y a pesar de todos los avances que se han realizado en este campo, existen todavía muchas preguntas interesantes por resolver. Por esto, la superconductividad es una de las áreas de investigación más dinámica de la física del estado sólido.

³Par de Cooper: pareja de electrones que se hallan atraídos débilmente y son los responsables de la superconductividad.

1.1. Superconductividad

El descubrimiento de la superconductividad aparece debido al interés que existía en la época por lograr licuar distintos gases conocidos, y así, poder acceder a la región de bajas temperaturas y estudiar el comportamiento físico de la materia cuando empiezan a desaparecer las excitaciones térmicas. En 1908, Kamerlingh Onnes logró obtener por primera vez He líquido a 4.2 K, éste hecho le hizo merecedor del premio Nobel de física y fue el primer paso para el descubrimiento de la superconductividad.

La superconductividad, es el fenómeno por medio del cual algunas sustancias pierden su resistividad eléctrica cuando la temperatura es reducida (ver Figura 1.2). La superconductividad ocurre en metales, aleaciones, compuestos intermetálicos y semiconductores. Los rangos de temperaturas de transición varían desde un milikelvin y pueden llegar aproximadamente hasta los 138 K.

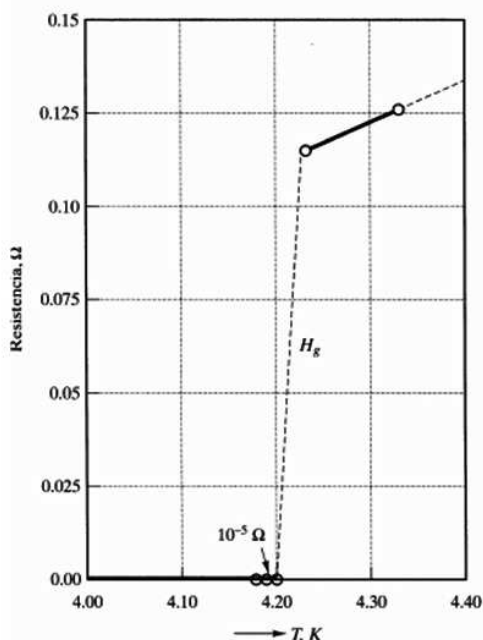


Figura 1.2: Comportamiento de la Resistencia eléctrica a temperaturas muy bajas para el caso del mercurio, descubierto por Kamerlingh en 1911. [19]

El estado superconductor, es un estado cuántico ordenado de los electrones de conducción en un metal. Este orden se da debido a la formación de pares de electrones (pares de Cooper) que se atraen débilmente producto de una transición de fase desde un estado desordenado a otro ordenado, y en el cual se rompe una o varias simetrías en la función de onda del par electrónico. La superconductividad es por tanto un fenómeno cuántico macroscópico.

La ruptura de la simetría de Calibre

En principio, la superconductividad parece ser un fenómeno fundamental y por eso hay que entenderla desde un punto de vista más fundamental que haciendo aproximaciones microscópicas. En tal sentido, se hace la observación de que existe una simetría global de calibre que se rompe de forma espontánea. Siguiendo a ref.[7], la superconductividad se puede entender como un estado de simetría espontáneamente roto. Si bien es un concepto clásico, aplica a diversos sistemas físicos en los cuales ocurren cambios espontáneos de una simetría u otra.

Para entender los cambios de simetría en la temperatura de transición superconductor (T_c) se puede entender de forma sencilla con una breve explicación de la teoría de Ginzburg-Landau [4], la cual es un resultado de derivación de la teoría BCS.

Para Ginzburg y Landau un superconductor se caracteriza por una cantidad $\Psi(\mathbf{r})$, denominada como parámetro de orden. Este parámetro posee características similares a una función de onda. En un sólido, la energía de Helmholtz⁴ depende de $\Psi(\mathbf{r})$ tal como

$$F_s = F_n + \int d^3r \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} |\nabla - \frac{2ie}{\hbar} \mathbf{A} \Psi(\mathbf{r})|^2 + a |\Psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{b}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^4 \right) \quad (1.1)$$

F_s es la energía de Helmholtz en el estado superconductor y F_n es la energía en el estado normal. Con $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ el potencial vector del campo magnético. Las constantes

⁴energía de Helmholtz: Energía que determina los procesos que son espontáneos en condiciones de temperaturas y volúmenes constantes

a , b y m^* dependen de cada material superconductor.

El parámetro de orden sugiere que sea una función de onda de la mecánica cuántica. La función $\Psi(\mathbf{r})$ arroja un posible valor mínimo de energía, entonces obedece a una ecuación de Schrödinger

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} |\nabla - \frac{2ie}{\hbar} \mathbf{A}|^2 + a + b |\Psi(\mathbf{r})|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.2)$$

en esta ecuación se describe el movimiento de las partículas cuánticas de masa m^* y carga $2e$ moviéndose en un campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. La razón por la que la carga es $2e$ se debe a que son pares de electrones los que se mueven, los pares de Cooper. Así se puede entonces encontrar el flujo de corriente de un superconductor

$$j_s = -\frac{2ie\hbar}{2m^*} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{(2e)^2}{m^*} \mathbf{A} |\Psi(\mathbf{r})|^2 \quad (1.3)$$

Lo anterior resulta una relación análoga a la mecánica ondulatoria para partículas de carga $2e$ que no puede tomarse tan literalmente. $\Psi(\mathbf{r})$ no es una función de onda habitual ya que la ecuación (1.2) no posee linealidad y con esto deja de cumplir con el principio de superposición. Por otro lado, $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ no es una densidad de probabilidad. Por estas razones se piensa en $\Psi(\mathbf{r})$ como una variable termodinámica, es decir, como una variable que marca los posibles estados de equilibrio termodinámico y sus energías libres.

La teoría Ginzburg-Landau obtiene un éxito ya que introduce las simetrías correctas, para cualquier $\Psi(\mathbf{r})$ existe un $e^{i\theta}\Psi(\mathbf{r})$ (θ un ángulo de fase) con la misma energía libre. Así pues, se tiene una transformación de calibre global y que no modifica la energía dada en la ecuación (1.1), entonces es claro ver que la energía de Helmholtz es invariante bajo transformaciones de calibre o simplemente dicha transformación pertenece al grupo de simetrías de F_s .

Estas transformaciones, pueden verse en un diagrama de Argand (ver Figura 1.3). La transformación $\Psi(\mathbf{r}) \rightarrow e^{i\theta}\Psi(\mathbf{r})$ sólo genera una rotación de un punto por un ángulo θ sobre el origen.

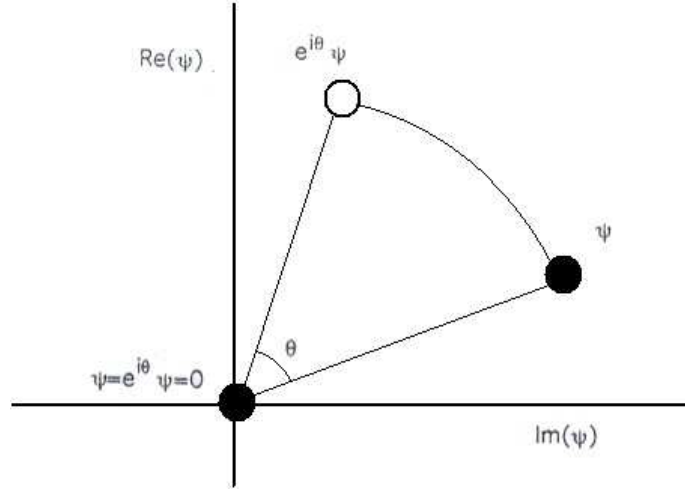


Figura 1.3: Diagrama de Argand para el Parámetro de orden.

Ahora bien, es claro que la energía F_s posee este tipo de simetría, pero su valor mínimo no necesita tenerla. Es entonces como nace la idea de la ruptura de la simetría de calibre de forma espontánea, la cual ocurre naturalmente debido al enfriamiento del material al alcanzar temperaturas por debajo de T_c . Si se considera un superconductor de tamaño infinito (para despreciar las superficies) y asumiendo que no hay campo magnético ($\mathbf{A} = 0$); Es así como la energía mínima de la ecuación (1.1) corresponde con un $\Psi(\mathbf{r})$ que es espacialmente constante, es decir, un $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_0$. La ecuación de Schrödinger se reduce en

$$(a + b|\Psi_0|^2) \Psi_0 = 0 \quad (1.4)$$

Resolviendo la ecuación (1.4) se obtienen dos soluciones, $\Psi_0 = 0$ y $|\Psi_0| = (-a/b)^{1/2}$. La segunda solución tiene sentido sólo si a/b es negativo. Se conoce que el parámetro "a" varía en función del campo de temperatura por lo que alterna de signo con la aproximación $a = a'(T - T_c)$ y de esta manera se define un punto de temperatura crítica en el modelo de Ginzburg y Landau [10]. El valor de "b" es siempre positivo. De esta manera, se reescriben las dos soluciones

$$|\Psi_0| = \begin{cases} 0 & \text{para } T > T_c \\ \left(\frac{(T_c - T)a'}{b}\right)^{1/2} & \text{para } T < T_c \end{cases} \quad (1.5)$$

Si se toma el estado normal $T > T_c$ con $\Psi_0 = 0$, y se aplica la transformación global $\Psi_0 \longrightarrow e^{i\theta}\Psi_0$ se encuentra una identidad trivial $e^{i\theta}0 = 0$. Es así como se logra un significado físico profundo, ya que para este estado Ψ_0 no se modifica bajo transformaciones globales de calibre. Las transformaciones de simetrías de este tipo son así de perfectas en un metal normal.

En otro sentido, para un estado superconductor $T < T_c$, el parámetro de orden Ψ_0 no es nulo. Si $\Psi_0 \neq 0$ entonces la transformación $e^{i\theta}\Psi_0 \neq \Psi_0$, de esta forma el estado del sistema cambia bajo esta transformación.

Finalmente, se concluye que la simetría global de calibre es una simetría para un estado que se encuentra con una temperatura por encima de T_c y que dicha simetría se rompe a temperaturas por debajo de T_c .

1.1.1. Superconductividad Convencional

Los superconductores convencionales son materiales que muestran la superconductividad descrita por la teoría de BCS. Dicha teoría tiene como postulado físico fundamental que entre los electrones que forman el par de Cooper existe una atracción débil neta que es debida a la mediación de los fonones o cuantos de vibración.

Debido a que los pares de Cooper están ligados débilmente, con frecuencia se rompen para formarse nuevamente, por lo regular con parejas diferentes. Los pares de Cooper son grandes, de esta manera, dentro de la región ocupada por los electrones en par, existirán muchos otros electrones, que igualmente podrían participar en el proceso de apareamiento. Si ellos pueden hacer esto, el sistema estará ligado más fuertemente y por lo tanto será más estable.

El apareamiento de electrones en pares de Cooper es favorable porque pone el material en un estado de energía menor. Con este apareamiento, los electrones atra-

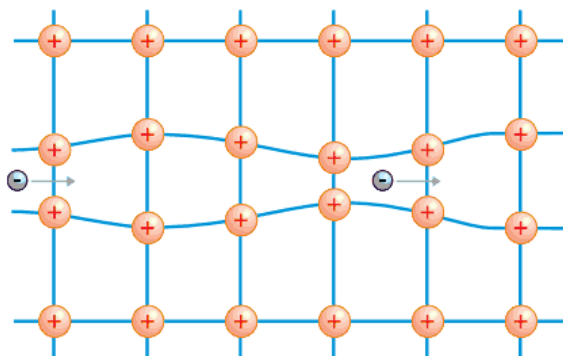


Figura 1.4: Electrones pasando a través de una red de átomos cargados positivamente.

viesan el superconductor fácilmente, con menos colisiones y de manera ordenada.

Todo este fenómeno es posible solamente a baja temperatura, porque los movimientos moleculares y las vibraciones de la red están reducidos.

1.1.2. Superconductividad No Convencional

Un superconductor no convencional se define como un superconductor en el cual el parámetro de orden se transforma como un vector bajo una rotación espacial de coordenadas [8], es decir, como un superconductor en el que la función de onda del par de Cooper se clasifica de acuerdo a las transformaciones de simetría del hamiltoniano que describe el sistema físico. En ciertas ocasiones, un superconductor no convencional puede ser definido de acuerdo con la siguiente relación

$$\sum_{\mathbf{k}} \Delta(\mathbf{k}) = 0,$$

donde se toma la suma sobre todos los momentos \mathbf{k} . Esta relación muestra que la dispersión de energía del estado superconductor no convencional toca la superficie de fermi en ciertas regiones. Algunos experimentos muestran que un superconductor es no convencional, entre ellos se tienen, la dependencia de la temperatura crítica en las propiedades termodinámicas y la dependencia de la temperatura que obedece a un comportamiento anómalo en diferentes propiedades de transporte muy por debajo de la temperatura de transición.

1.2. Estado con paridad Triplete

Se define un superconductor en estado triplete como un superconductor en el cual los pares de Cooper se unen en tripletes de espín⁵. Los tripletes de espín tienen espines paralelos el uno al otro. En los superconductores en estado triplete, el parámetro de orden se representa por un vector $\Psi(\mathbf{k})$. En los superconductores triplete con un parámetro de orden del tipo $k_x \pm ik_y$ hay un magnetismo residual orbital de los pares de Cooper.

En general se tiene un par de Cooper, es decir, un par de fermiones idénticos con espín $1/2$ que resultan un espín total $S = 1$. En total existen tres estados con este tipo de paridad, $|1, 1\rangle = \uparrow\uparrow$, $|1, 0\rangle = [|\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow]/\sqrt{2}$ y $|1, -1\rangle = \downarrow\downarrow$

⁵Triplete de espín: es un conjunto de tres estados cuánticos de un sistema, cada uno con espín total $S = 1$ (en unidades de \hbar).

Capítulo 2

Fundamentos Teóricos

2.1. Energía de un Superconductor en estado normal para una red cuadrada

El método de enlace fuerte (Tight Binding), sugerido por Bloch en 1928 [12], consiste en expandir los estados del cristal en combinaciones lineales de orbitales atómicos de los átomos componentes. Este método provee una descripción razonable de los estados ocupados en cualquier tipo de cristal y además de los estados de conducción.

Se quiere encontrar la energía de conducción de los electrones en un metal normal, la cual se denota $\xi(\mathbf{k})$ con una dependencia del vector de la red recíproca para predecir las energías de las excitaciones electrónicas dadas por la ecuación (2.1) y otro tipo de excitaciones como son los pares de Cooper que poseen una brecha de excitación denotada $\Delta_{\mathbf{k}}$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} \quad (2.1)$$

Se considera una red cuadrada con un átomo por celda unitaria (ver Figura 2.1). El hamiltoniano que describe la estructura de banda para esta red se define como

$$H = - \sum_{i,j} t(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) c_{i,\sigma_i}^\dagger c_{j,\sigma_j} \quad (2.2)$$

donde c_{i,σ_i}^\dagger es el operador que crea un electrón con espín σ en el sitio \mathbf{i} de la red cuadrada. Se considera el valor de " t " negativo para simular un potencial atómico atractivo. La expresión para la energía en el modelo de tight-binding se puede obtener primeramente, reescribiendo el hamiltoniano en la representación del espacio de momento

$$H_{tight-binding} = \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (2.3)$$

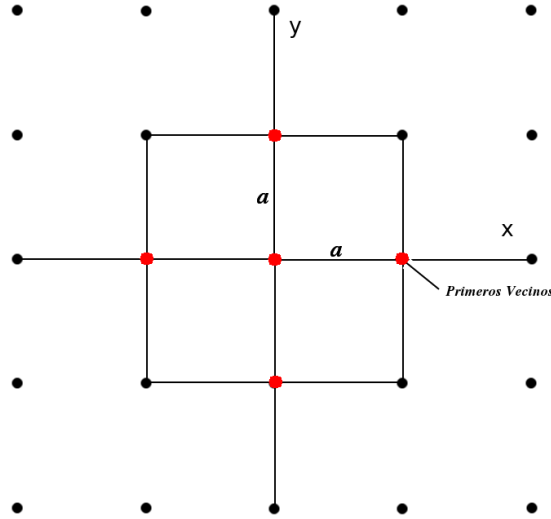


Figura 2.1: Red Cuadrada en el modelo de tight-binding

las energías $\xi(\mathbf{k})$, se pueden escribir como una serie de Fourier de la forma

$$\xi(\mathbf{k}) = E_0 - \mu - \sum_{\mathbf{n}=1} t_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{n}}} \quad (2.4)$$

donde $t_{\mathbf{n}}$ son los valores del "*Salto*", $E_0 - \mu$ representa la energía del estado base en presencia del potencial cristalino o bien la energía del electrón en ese punto de la red. Esta expresión es periódica en el espacio recíproco $\xi(\mathbf{k}) = \xi(\mathbf{k} + \mathbf{G})$, donde \mathbf{G} es cualquier vector de la red recíproca. En esta aproximación de enlace fuerte, sólo se considera la interacción entre los primeros vecinos de la red cuadrada, con un

valor de salto constante para todos los átomos de la red ($t_{\mathbf{n}} = t$). La expansión de la ecuación (2.4) se reduce a cuatro términos

$$\sum_{\mathbf{n}=1}^4 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{\mathbf{n}}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_3} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_4} \quad (2.5)$$

con las relaciones,

$$\mathbf{R}_1 = a\hat{x} \quad \mathbf{R}_2 = a\hat{y} \quad \mathbf{R}_3 = -a\hat{x} \quad \mathbf{R}_4 = -a\hat{y} \quad (2.6)$$

$$\mathbf{k} = k_x\hat{x} + k_y\hat{y} \quad (2.7)$$

Introduciendo esto y con la ecuación (2.5), se tiene la expresión de la energía para el modelo de red cuadrada

$$\xi(\mathbf{k}) = E_0 - \mu - 2t[\cos(ak_x) + \cos(ak_y)] \quad (2.8)$$

En la Figura (2.2), se observa la forma del espectro de energía en un metal normal para una red cuadrada, la cual varía entre 0meV y 5meV que son valores tomados con medidas de Arpes [9].

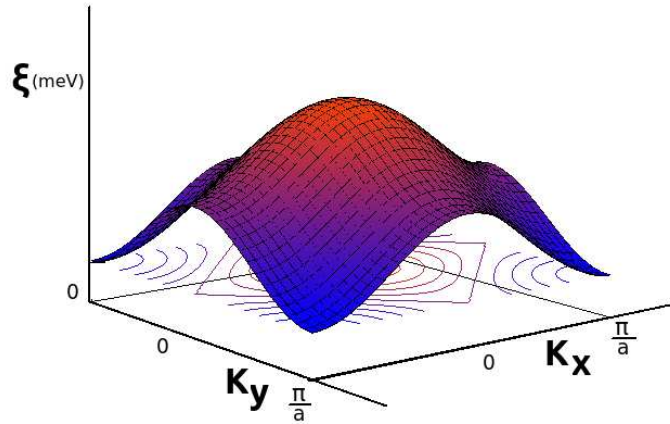


Figura 2.2: Energía del estado normal

La suma en el espacio de Fourier para una red cuadrada puede ser sustituida sobre el espacio recíproco en promedios en la superficie de Fermi [8], de acuerdo a la

siguiente relación

$$\sum_{\mathbf{k}} (...) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|} \int d\xi (...), \quad (2.9)$$

con $dS_F = \sqrt{(dk_x)^2 + (dk_y)^2}$ y $|\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|$ es el módulo de la velocidad de Fermi. La densidad de estados N_F es definida como $N_F = (4\pi^2)^{-1} \int dS_F |\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|^{-1}$, se define un promedio normalizado sobre la superficie de Fermi como

$$\langle (...) \rangle_{FS} = \frac{1}{(2\pi)^2 N_F} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|} (...) \quad (2.10)$$

El módulo de la velocidad de Fermi viene dada por

$$|\mathbf{v}_{\mathbf{k}}| = \sqrt{v_{k_x}^2 + v_{k_y}^2} \quad (2.11)$$

las respectivas componentes de la velocidad de Fermi vienen descritas por las variaciones de la energía respecto al vector de la red recíproca, de acuerdo a cada dirección

$$v_{k_x} = \frac{\partial \xi(\mathbf{k})}{\partial k_x} \quad v_{k_y} = \frac{\partial \xi(\mathbf{k})}{\partial k_y} \quad (2.12)$$

En el caso de la ecuación (2.4), dichas componentes toman la forma

$$v_{k_x} = 2at \sin(ak_x) \quad v_{k_y} = 2at \sin(ak_y) \quad (2.13)$$

para integrar sobre la superficie de Fermi, dS_F definida anteriormente se puede cambiar a una integral en una variable

$$dS_F = \sqrt{(dk_x)^2 + (dk_y)^2} = dk_x \sqrt{1 + \left(\frac{dk_y}{dk_x}\right)^2} = dk_x \sqrt{1 + \left(\frac{v_{k_x}}{v_{k_y}}\right)^2} \quad (2.14)$$

para tener $ak_y = f(ak_x)$, se toma el valor para el cual $\xi(\mathbf{k}) = 0$, que conlleva a la siguiente expresión

$$ak_y = \arccos \left(\frac{(E_0 - \mu) - 2t \cos(ak_x)}{2t} \right) \quad (2.15)$$

de esta manera la ecuación (2.14) se reescribe como

$$dS_F = dk_x \sqrt{1 + \frac{\sin^2(ak_x)}{1 - \left(\frac{(E_0 - \mu) - 2t \cos(ak_x)}{2t}\right)^2}} \quad (2.16)$$

En la Figura (2.3), se observa diferentes superficies de Fermi, desde unas pequeñas superficies con valores de "Salto" $t_1 = 0,3\text{meV}$, $t_2 = 0,4\text{meV}$, $t_3 = 0,6\text{meV}$ hasta llegar a un $t_4 = 1,0\text{meV}$ que muestra un estado lleno que no contiene electrones libres. En la superficie de Fermi en estudio (ver Figura 2.4), los promedios van desde un $K_{x_{min}}$ hasta un $K_{x_{máx}}$ con un valor de $t = 0,4\text{meV}$. Como la superficie está centrada en la primera zona de Brillouin entonces tenemos un $K_{x_{min}} = 0$ y, tomará el máximo valor cuando $K_x = K_y$ sobre la superficie de Fermi, en tal caso

$$K_{x_{máx}} = \arccos\left(\frac{(E_0 - \mu)}{4t}\right) \quad (2.17)$$

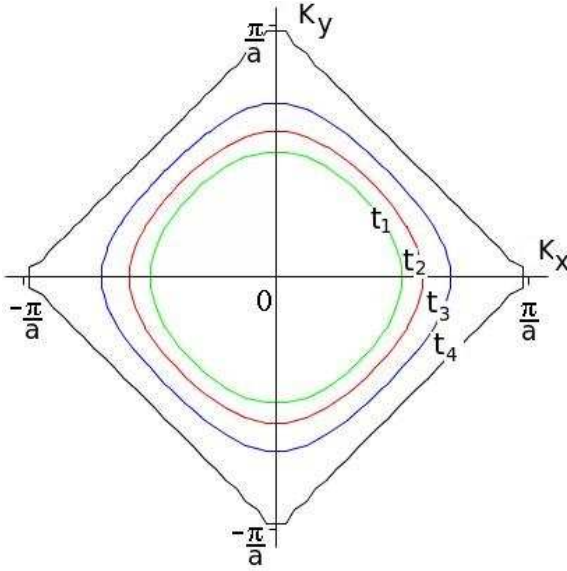


Figura 2.3: Superficies de Fermi para diversos estados en la primera zona de Brillouin.

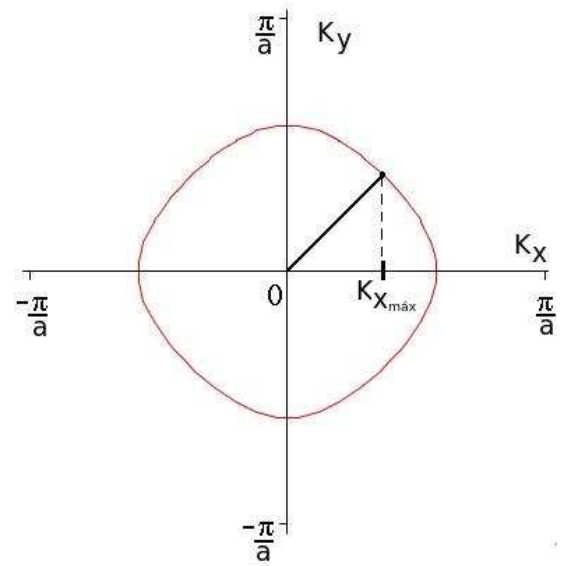


Figura 2.4: Superficie de Fermi para un Superconductor en estado Triplete en la primera zona de Brillouin.

2.2. Pares de Cooper para un estado triplete

Un sistema de dos electrones con cantidad de movimiento, que forman un estado ligado por intercambio de fonón se le denomina par de Cooper. Un par de Cooper se comporta como un Bosón, es decir, posee espín neto entero. Esto implica que en el cero absoluto existe un único estado energético y todos los pares de electrones o pares de Cooper ocupan el mismo estado energético, que se denomina estado fundamental. De acuerdo a V. Mineev y K. Samokhin [11], que describen que para dos electrones que se atraen débilmente y en el que $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ representa la función de onda de dicho par de electrones, se busca la solución a la ecuación de Schrödinger para dicho sistema

$$\frac{-\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2)\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (\Delta + E_F)\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (2.18)$$

donde Δ es la energía de un par de electrones medidas respecto a la energía de dos electrones desacoplados y E_F es la energía de Fermi, $\hbar^2 k_F^2/m$

La función de onda para este par de electrones, en un sistema de referencia relativo en el cual $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, queda $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r})$, por lo tanto la ecuación (2.18), se convierte en

$$\frac{-\hbar^2}{m} \frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}^2} + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = (\Delta + E_F)\psi(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

Pasando la función de onda a la representación de momento,

$$g(\mathbf{k}) = \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) \quad (2.20)$$

Se obtiene entonces,

$$\frac{-\hbar^2 k^2}{m} g(\mathbf{k}) + \int \frac{d^3\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') g(\mathbf{k}') = (\Delta + E_F) g(\mathbf{k}) \quad (2.21)$$

El potencial de interacción,

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \int d^3\mathbf{r} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

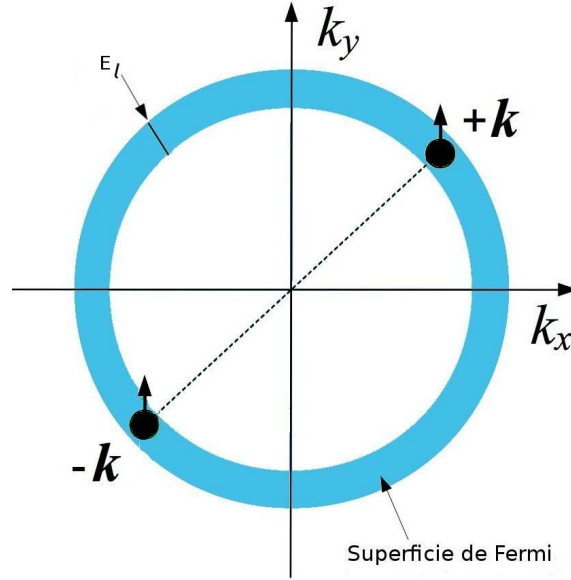


Figura 2.5: Dos electrones en estado triplete moviéndose sobre una superficie de Fermi esférica.

Se expresa el potencial de interacción en la base de los armónicos esféricos con momento angular orbital l y su proyección sobre el eje z determinado por m , y $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k_F$

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \sum_{l=0}^{\infty} V_l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}') \quad (2.23)$$

Se supone que la interacción se es atractiva sobre una capa delgada de la superficie de Fermi, es decir $E_l \ll E_F$

$$V_l(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \begin{cases} -V, & \text{para } E_F < \hbar^2 k^2/2m, \hbar^2 k'^2/2m < E_F + E_l \\ 0, & \text{para el resto de valores} \end{cases} \quad (2.24)$$

en la ecuación (2.21), se hace una sustitución muy acostumbrada, lo cual corresponde al cambio en la variable de integración (\mathbf{k}'), para integrar sobre la energía $\xi = \hbar^2 k_F^2/2m - E_F$ y sobre los ángulos que definen la dirección del vector \mathbf{k} según la

regla

$$\int \frac{d^3\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \longrightarrow N_0 \int d\xi' \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \quad (2.25)$$

donde N_0 es la densidad de estados en el nivel de Fermi. Con estos cambios se tiene

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{m}(k^2 - k_F^2) - \Delta \right\} g(\mathbf{k}) - N_0 \int_0^{E_l} d\xi' \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} V_l \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}') g(\mathbf{k}') = 0 \quad (2.26)$$

los valores del momento angular orbital l corresponden a los autoestados $\{g_l(\mathbf{k}), \Delta_l\}$ determinados por la ecuación (2.26)

$$g(\mathbf{k}) = g_{l'}(\mathbf{k}) = \sum_{m'=-l'}^{l'} a_{l'm'}(k) Y_{l'm'}(\hat{\mathbf{k}}) \quad (2.27)$$

con lo anterior y con la siguiente propiedad de ortogonalidad de las funciones esféricas se reduce la expresión (2.26)

$$\int \frac{d\Omega'}{4\pi} Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}') Y_{l'm'}(\hat{\mathbf{k}}') = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (2.28)$$

se obtiene

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{m}(k^2 - k_F^2) - \Delta_l \right\} g_l(\mathbf{k}) - N_0 V_l \int_0^{E_l} d\xi g_l(\mathbf{k}) = 0 \quad (2.29)$$

que puede ser escrita como

$$g_l(\mathbf{k}) = \frac{N_0 V_l \int_0^{E_l} d\xi g_l(\mathbf{k})}{2\xi - \Delta_l} \quad (2.30)$$

En resumidas cuentas, integrando en ambos lados sobre ξ

$$1 = N_0 V_l \int_0^{E_l} \frac{d\xi}{2\xi - \Delta_l} = \frac{N_0 V_l}{2} \ln \left(\frac{E_l - \frac{\Delta_l}{2}}{-\frac{\Delta_l}{2}} \right) \quad (2.31)$$

Sabiendo, que la interacción es suficientemente débil, $N_0 V_l \ll 1$, por lo tanto se encuentra

$$\Delta_l = -2E_l e^{(-2/N_0 V_l)} \quad (2.32)$$

Para un estado triplete $l = 1$ y N_0 representa en forma general la energía de Fermi es una dirección de espín, como se tiene dos direcciones de espín, la densidad total de estados en el nivel de Fermi es igual a

$$N_{0\uparrow} + N_{0\downarrow} = 2N_0 = N_F \quad (2.33)$$

$$\Delta_1 = -2E_1 e^{(-4/N_F V_1)} \quad (2.34)$$

2.3. Parámetro de orden triplete en una red cuadrada

Para tener una descripción de la función de onda que describe el comportamiento mecánico cuántico de un par de Cooper en un superconductor es básicamente obtener el producto directo de dos funciones, la primera es la función de onda orbital en representación del espacio de momento y, la segunda es la componente de espín del par de Cooper en el espacio de espín [11]. Para objetivos del presente trabajo, se estudiará el caso de un superconductor en estado triplete en una red cuadrada. En general para una red tetragonal la función de onda del par de Cooper se describe por el tensor de momento [22],

$$\Psi_{Trip}(\mathbf{k}) = i (\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sigma_y = \begin{pmatrix} -d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) & d_z(\mathbf{k}) \\ d_z(\mathbf{k}) & d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

donde σ está definido por las matrices de Pauli¹

$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y} + \sigma_z \hat{z} \quad (2.36)$$

¹ Las matrices de Pauli se definen como

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\mathbf{d}(\mathbf{k})$ es un vector periódico en el espacio recíproco, $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \mathbf{d}(\mathbf{k} + \mathbf{G})$, con \mathbf{G} cualquier vector de la red recíproca. Para un estado triplete sobre una red, el vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ posee paridad impar $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = -\mathbf{d}(-\mathbf{k})$ definida por el principio de Pauli [11]; La magnitud y dirección del vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ varían sobre la superficie de Fermi en el espacio \mathbf{k} y se expande en una serie de Fourier

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \sum_n \mathbf{d}(n) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) \quad (2.37)$$

Donde los coeficientes $\mathbf{d}(n)$ son parámetros de Fourier para estados tripletes y \mathbf{R}_n son vectores de la red real. La ecuación (2.37) obedece a las propiedades de transformación del grupo puntual de simetría D_{4h} de una red tetragonal². Siguiendo los resultados de Rice y Sigrist [14], la componente "z" del vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ es la responsable del estado triplete superconductor

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \hat{\mathbf{e}}_z d_z(\mathbf{k}) = \hat{\mathbf{e}}_z \sum_n d_z(n) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_n) \quad (2.38)$$

Se simplifica el análisis del parámetro de orden desde una red tetragonal a una red cuadrada, en la que tenemos para el vector \mathbf{k} solo componentes k_x y k_y . En este caso la componente $d_z(\mathbf{k})$ se puede expandir en términos de las funciones base $\phi_i^{E_u}(\mathbf{k})$ y las componentes del llamado parámetro de orden $\psi_i^{E_u}$ de la representación irreducible³ bidimensional E_u

$$d(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^2 \psi_i^{E_u} \phi_i^{E_u}(\mathbf{k}) = \psi_x^{E_u} \phi_x^{E_u}(\mathbf{k}) + \psi_y^{E_u} \phi_y^{E_u}(\mathbf{k}) \quad (2.39)$$

siendo así, siguiendo a ref. [8], se tiene que $\psi_x \propto 1$ y $\psi_y \propto i$. Por otra parte las funciones base para este grupo corresponden con lo mostrado en la tabla (2.1).

No existe función base unidimensional según lo mostrado en la tabla (2.1), se reescribe el vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ como

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = (\sin(ak_x) + i\sin(ak_y)) \hat{\mathbf{z}} \quad (2.40)$$

²Red tetragonal: Red compuesta por sus tres angulos rectos, dos aristas iguales y una diferente.

³Representación irreducible: Representación de un grupo no nulo que no puede ser descompuesto en una suma directa de otras representaciones.

Tabla 2.1: Representación Irreducible. Funciones base del parámetro de orden para una red cuadrada.

Representación Irreducible	Función base	
A_1	X	
A_2	X	
B_1	X	
B_2	X	
E_u	$E_x = \sin(ak_x)$	$E_y = \sin(ak_y)$

la condición de paridad

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = -\mathbf{d}(-\mathbf{k}) \quad (2.41)$$

Se puede obtener el módulo del parámetro de orden el cual corresponde con el mismo módulo del vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ es decir,

$$|\Psi_{Trip}(\mathbf{k})|^2 = |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 = \sin^2(ak_x) + \sin^2(ak_y) \quad (2.42)$$

La brecha superconductora en el espectro de excitaciones elementales es proporcional al valor absoluto del parámetro de orden [11], $\Delta_{\mathbf{k}} \sim |\mathbf{d}(\mathbf{k})|$, se denota Δ_0 como el valor mínimo de energía que une al par de Cooper.

$$\Delta_{\mathbf{k},\alpha\beta} = i\Delta_0 \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot (\boldsymbol{\sigma}\sigma_y)_{\alpha\beta} \quad (2.43)$$

cuyo cuadrado se expresa por

$$|\Delta_{\mathbf{k}}|^2 = \Delta_0^2 |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \quad (2.44)$$

de acuerdo a la ecuación (2.40)

$$|\Delta_{\mathbf{k}}| = \Delta_0 (\sin^2(k_x a) + \sin^2(k_y a))^{1/2} \quad (2.45)$$

Esta expresión de la brecha en función del vector \mathbf{k} de la red recíproca, se puede observar en la Figura (2.6)

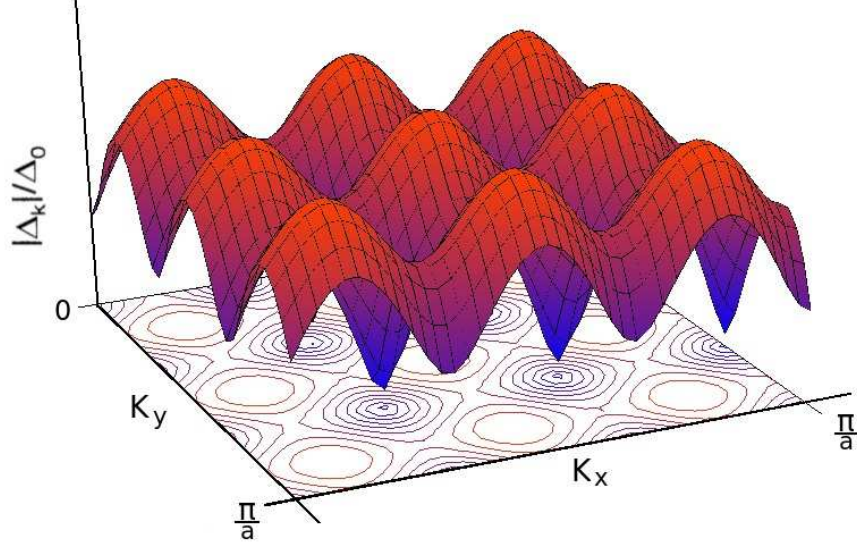


Figura 2.6: Brecha superconductora bidimensional como función del espacio recíproco, para un modelo extendido de la primera zona de Brillouin.

2.4. Formalismo de Gorkov

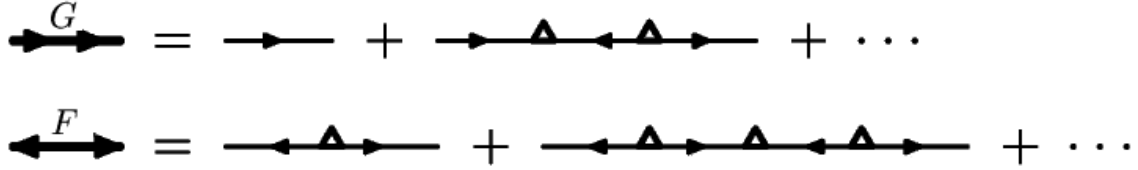
Para cuantificar los cálculos de las propiedades físicas presentes en un superconductor, Lev Gorkov [20] desarrolló una metodología basada en el formalismo de las funciones de Green en el espacio de los momentos y las frecuencias. Dicha técnica combinada con los diagramas de Feynman⁴ permite el cálculo de expresiones adecuadas para obtener resultados tales como: la brecha de energía, la densidad de estados superconductora, el tiempo de vida medio de los pares de Cooper, el calor específico, la atenuación del ultrasonido y otras propiedades.

Se definen tres Funciones de Green [21], como lo indican los diagramas de Feynman presentes en las Figuras (2.7) , (2.8) y (2.9)

⁴Diagramas de Feynman: representaciones pictóricas de las expresiones matemáticas que rigen el comportamiento de las partículas subatómicas

Figura 2.7: $G^0_{\alpha\beta}(\epsilon, \mathbf{k})$ normal descamisada.Figura 2.8: $G_{\alpha\beta}(\epsilon, \mathbf{k})$ normal encamisada.Figura 2.9: $F_{\alpha\beta}(\epsilon, \mathbf{k})$ anómala encamisada.

$G^0_{\alpha\beta}(\epsilon, \mathbf{k})$, representa la función de Green para electrones libres y se le conoce como función de Green normal descamisada. Para el cual α, β representan índices de espín; $G_{\alpha\beta}(\epsilon, \mathbf{k}) = \delta_{\alpha\beta}G(\epsilon, \mathbf{k})$ y $F_{\alpha\beta}(\epsilon, \mathbf{k}) = -i\sigma_y F(\epsilon, \mathbf{k})$. Estas funciones contienen todos los efectos que existen en el superconductor. F y G se pueden expandir en función del parámetro de orden como se muestra en la Figura (2.10)

Figura 2.10: Expansión de los diagramas de Feynman para las Funciones de Green F y G .

Despreciando los términos de orden superior nos queda que G está representada por (2.46), que conjuntamente con F de la ecuación (2.47) y G^0 de la ecuación (2.48) forman un sistema de ecuaciones

$$G_{\alpha\beta}(\epsilon, \mathbf{k}) = G^0_{\alpha\beta}(\epsilon, \mathbf{k}) + G^0_{\alpha\lambda}(\epsilon, \mathbf{k})\Delta^{\dagger}_{\lambda\mu}(\mathbf{k})F_{\mu\beta}(\epsilon, \mathbf{k}) \quad (2.46)$$

$$F_{\alpha\beta}(\epsilon, \mathbf{k}) = G^0_{\alpha\lambda}(-\epsilon, \mathbf{k})\Delta_{\lambda\mu}(\mathbf{k})G_{\mu\beta}(\epsilon, \mathbf{k}) \quad (2.47)$$

$$G^0_{\alpha\beta}(\epsilon, \mathbf{k}) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{\epsilon - \xi_{\mathbf{k}}} \quad (2.48)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones y con la propiedad señalada en ref. [11] en la cual $\Delta^{\dagger}_{\lambda\mu} = -\Delta^{\dagger}_{\mu\lambda}$, se encuentra que

$$G_{\alpha\beta}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{\varepsilon + \xi_{\mathbf{k}}}{\varepsilon^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2 - |\Delta(\mathbf{k})|^2} \delta_{\alpha\beta} \quad (2.49)$$

$$F_{\alpha\beta}(\varepsilon, \mathbf{k}) = -\frac{\Delta_{\alpha\beta}}{\varepsilon^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2 - |\Delta(\mathbf{k})|^2} \quad (2.50)$$

El espectro de energías de un superconductor están determinados por los polos de la función $G_{\alpha\beta}(\varepsilon, \mathbf{k})$ dada en la ecuación (2.49)

$$\det \parallel \varepsilon^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2 - \Delta(\mathbf{k})\Delta^\dagger(\mathbf{k}) \parallel = 0 \quad (2.51)$$

utilizando el resultado de la ecuación (2.44) y resolviendo lo anterior, encontramos el espectro de energía de las excitaciones electrónicas en un superconductor

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_0^2 |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2} \quad (2.52)$$

Capítulo 3

Efecto de las impurezas en la superconductividad no convencional

Se conoce que las impurezas no magnéticas no influyen en las propiedades termodinámicas en los superconductores convencionales (Teorema de Anderson)[15]. Un ejemplo de ello es la temperatura de transición (T_c), la cual es independiente de la concentración de la dispersión de impurezas no magnéticas. Por otro lado se conoce que dicha dispersión destruye la coherencia del espín en los pares de Cooper en superconductores no convencionales [11]. El decaimiento de T_c , puede ser función de la concentración de impurezas no magnéticas (n_{imp}). Así la temperatura máxima de transición T_c viene dada para el caso cuando $n_{imp} = 0$ y se le denota como T_{c0} [11, 22].

Por esta razón la disminución de T_c es debida a la dispersión por las impurezas no magnéticas en los pares de cooper no convencionales, que destruyen la coherencia de las funciones de onda de los electrones apareados.

En este trabajo se plantea estudiar el efecto que causa la presencia de impurezas no magnéticas en un superconductor no convencional en una red cuadrada y en estado triplete. En primer lugar, hacer un estudio a la brecha de energía superconductora para notar el efecto de decaimiento de la temperatura de transición (ecuación de Abrikosov-Gorkov); en segundo lugar, estudiar la densidad de estados

superconductora para visualizar los estados residuales causados por las impurezas; en tercer lugar, estudiar el tiempo de decaimiento de dichos estados de impurezas y, finalmente estudiar el efecto de la densidad residual de estados [17].

3.1. Impurezas no magnéticas en un metal normal (Técnica de S. Edwards)

S. Edwards en 1961 [18], introdujo la técnica que permitió utilizar los diagramas de Feynman para incluir el hamiltoniano que describiera el efecto de las impurezas en un metal normal, dicho hamiltoniano viene dado por

$$H_{imp} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} U_0 c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}', \sigma} \quad (3.1)$$

donde U_0 es el potencial de dispersión del electrón en el campo de impurezas.

Dicho modelo asume las siguientes condiciones físicas: en $T = 0$, las impurezas son iguales e independientes entre ellas, se encuentran distribuidas de forma aleatoria en el metal normal (sin embargo a escala macroscópica el metal es homogéneo), este modelo es cuántico, las impurezas dispersan electrones elásticamente (no hay pérdida de energía en las colisiones), existen N impurezas y, finalmente el potencial de dispersión toma la forma

$$U_0(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (3.2)$$

\mathbf{R}_i representa el punto de dispersión de la impureza.

Se define una función de Green encamisada promediada por las impurezas no magnéticas, en componentes de Fourier y en su forma autoconsistente viene dada de la siguiente manera

$$\langle G(\mathbf{k}, \varepsilon) \rangle = G^0(\mathbf{k}, \varepsilon) + G^0(\mathbf{k}, \varepsilon) \Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon) \langle G(\mathbf{k}, \varepsilon) \rangle \quad (3.3)$$

en este caso, el promedio representa una suma sobre todos los impulsos electrónicos

\mathbf{k} y por todos los puntos j de localización de cada impureza

$$\langle \dots \rangle = \sum_{k,j} \quad (3.4)$$

con la función de Green normal descamisada

$$G^0(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{i\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}}} \quad (3.5)$$

En un diagrama de Feynman como el de la Figura (3.1) se puede observar la forma de la ecuación (3.3)

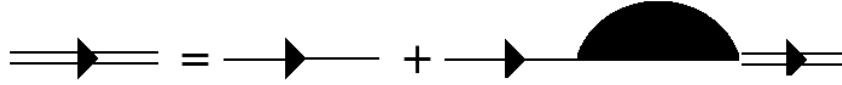


Figura 3.1: Diagrama de Feynman para la función de Green encamisada y promediada por impurezas no magnéticas

El término Σ denota la energía de renormalización por la presencia de impurezas no magnéticas, que puede expresarse en un diagrama de Feynman como lo muestra la Figura (3.2) y de acuerdo a Edwards viene dada por

$$\Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon) = N \sum_{\mathbf{k}'} |U_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \frac{1}{i\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}'}} \quad (3.6)$$

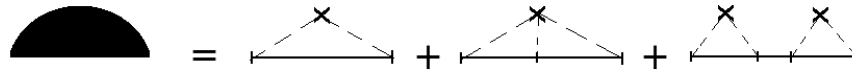


Figura 3.2: Diagrama de Feynman para la auto-energía renormalizada por impurezas no magnéticas

La solución a la ecuación (3.3), que representa la función de Green renormalizada

por los efectos de la dispersión de impurezas del tipo no magnéticas y, dadas sus energías por ecuación (3.6), queda que

$$\langle G(\mathbf{k}, \varepsilon) \rangle = \left(\frac{1}{G^0(\mathbf{k}, \varepsilon)} - \Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon) \right)^{-1} \quad (3.7)$$

3.2. Formalismo de la auto-energía renormalizada por la presencia de impurezas no magnéticas para un superconductor no convencional

El formalismo a utilizar para estudiar la energía renormalizada por la presencia de impurezas no magnéticas es la aproximación dada por una matriz \hat{T} , la cual se conoce como la matriz de dispersión de impurezas no magnéticas. La concentración de impurezas viene dado por una densidad total n_{imp} muy pequeña, la interferencia entre diferentes impurezas se desprecia y cada impureza se comporta como un dispersor independiente. De esta manera, el efecto total de impurezas se obtiene simplemente multiplicando el resultado de una impureza única por n_{imp} [24]. El hamiltoniano de una única impureza se describe por el de la ecuación (3.1)

La función de Green en un superconductor para un par de Cooper en presencia de un potencial de impurezas no magnéticas, se le conoce como la función de Green de Nambu [25], la cual se define como

$$\hat{G}(\varepsilon, \mathbf{k}) = \hat{G}_0(\varepsilon, \mathbf{k}) + \hat{G}_0(\varepsilon, \mathbf{k})\hat{T}(\varepsilon)\hat{G}_0(\varepsilon, \mathbf{k}) \quad (3.8)$$

el símbolo \wedge encima de la función de Green significa que es una matriz bidimensional en el estado superconductor debido a que toma en cuenta el espacio de espín además del espacio recíproco, cualquier función en el espacio de espín como se sabe puede ser descompuesto en términos de las matrices de Pauli. Dicha función se convierte en un escalar cuando se encuentra en el estado de un metal normal. La función de Green normal en el estado superconductor viene dada por

$$\hat{G}_0(\varepsilon, \mathbf{k}) = \frac{\varepsilon \hat{\sigma}_0 + \xi_{\mathbf{k}} \hat{\sigma}_3 + \Delta(\mathbf{k}) \hat{\sigma}_1}{\varepsilon^2 - \xi_{\mathbf{k}}^2 - |\Delta(\mathbf{k})|^2} \quad (3.9)$$

La matriz \hat{T} tiene la siguiente forma

$$\hat{T}(\varepsilon) = \hat{U}_0 \cdot \left[\hat{\sigma}_0 - \hat{U}_0 \sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_0(\varepsilon, \mathbf{k}) \right]^{-1} \quad (3.10)$$

con la matriz del potencial de impurezas $\hat{U}_0 = U_0 \hat{\sigma}_3$. Es conveniente definir un promedio donde las sumas en el espacio \mathbf{k} sean ahora promedios sobre la superficie de Fermi para cada componente de la función de Green (3.9) descritas por las matrices de Pauli

$$\sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_0(\varepsilon, \mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} (G_0^0(\varepsilon, \mathbf{k}) \hat{\sigma}_0 + G_0^1(\varepsilon, \mathbf{k}) \hat{\sigma}_1 + G_0^3(\varepsilon, \mathbf{k}) \hat{\sigma}_3) \quad (3.11)$$

al estudiar cada componente por separado se tiene que

$$\sum_{\mathbf{k}} G_0^0(\varepsilon, \mathbf{k}) = -i\pi N_F \left\langle \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta(\mathbf{k})|^2}} \right\rangle_{S.F} \quad (3.12)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} G_0^1(\varepsilon, \mathbf{k}) = -i\pi N_F \left\langle \frac{\Delta(\mathbf{k})}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta(\mathbf{k})|^2}} \right\rangle_{S.F} \quad (3.13)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} G_0^3(\varepsilon, \mathbf{k}) = -i\pi N_F \left\langle \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta(\mathbf{k})|^2}} \right\rangle_{S.F} \quad (3.14)$$

se ha integrado sobre el espacio \mathbf{k} para la energía del metal y promediado en el modelo de enlace fuerte sobre la superficie de Fermi. Se tiene que $\sum_{\mathbf{k}} G_0^1(\varepsilon, \mathbf{k}) = 0$ para un superconductor en estado triplete ya que el parámetro de orden posee paridad impar. El valor de $\sum_{\mathbf{k}} G_0^3(\varepsilon, \mathbf{k}) = 0$ para suponer que en el sistema metálico existe una simetría electrón-hueco. Con estas condiciones, reescribimos (3.11) con una nueva función que llamaremos $g(\varepsilon)$

$$\sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_0(\varepsilon, \mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} G_0^0(\varepsilon, \mathbf{k}) \hat{\sigma}_0 = -i\pi N_F g(\varepsilon) \hat{\sigma}_0 \quad (3.15)$$

con $g(\varepsilon)$ dado por

$$g(\varepsilon) = \left\langle \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta(\mathbf{k})|^2}} \right\rangle_{S.F} \quad (3.16)$$

con este resultado, se puede resolver el cálculo de la matriz inversa de la ecuación (3.10)

$$\hat{T}(\varepsilon) = U_0 \hat{\sigma}_3 \cdot [\hat{\sigma}_0 + i\pi N_F U_0 \hat{\sigma}_3 \cdot (g(\varepsilon) \hat{\sigma}_0)]^{-1} \quad (3.17)$$

$$\hat{T}(\varepsilon) = U_0 \hat{\sigma}_3 \cdot [\hat{\sigma}_0 + \pi N_F U_0 g(\varepsilon) \hat{\sigma}_3]^{-1} \quad (3.18)$$

$$[\hat{\sigma}_0 + i\pi N_F U_0 g(\varepsilon) \hat{\sigma}_3]^{-1} = \frac{[\hat{\sigma}_0 + i\pi N_F U_0 g(\varepsilon) \hat{\sigma}_3]}{1 - (i\pi N_F U_0 g(\varepsilon))^2} \quad (3.19)$$

$$\hat{T}(\varepsilon) = U_0 \hat{\sigma}_3 \cdot \left[\frac{\hat{\sigma}_0 + i\pi N_F U_0 g(\varepsilon) \hat{\sigma}_3}{1 - (i\pi N_F U_0 g(\varepsilon))^2} \right] \quad (3.20)$$

$$\hat{T}(\varepsilon) = \frac{U_0 \hat{\sigma}_3 + i\pi N_F U_0^2 g(\varepsilon) \hat{\sigma}_0}{1 - (i\pi N_F U_0 g(\varepsilon))^2} \quad (3.21)$$

En lugar de utilizar el potencial de impurezas U_0 , se introduce el parámetro de cambio de fase "c" de la onda del par de cooper definido como $1/c = \pi N_F U_0 = \tan(\delta_0)$ relacionado con el desplazamiento δ_0 de la fase de la función de onda. Recordando que al suponer simetría electrón-hueco se obtiene que la componente $T^3(\varepsilon) = 0$ y, finalmente queda

$$\hat{T}(\varepsilon) = \frac{i(\pi N_F)^{-1} g(\varepsilon)}{c^2 + |g(\varepsilon)|^2} \hat{\sigma}_0 \quad (3.22)$$

La auto-energía inducida por causa de la concentración de impurezas se denota por $\Sigma(\varepsilon) = n_{imp} T(\varepsilon)$, donde se define el parámetro $\Gamma^+ = n_{imp}/(\pi^2 N_F)$ [11, 26]. La auto-energía renormalizada del superconductor se reescribe por $\tilde{\varepsilon}$ y viene dada por

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon + \Sigma(\tilde{\varepsilon}) \quad (3.23)$$

$\tilde{\varepsilon} = \hbar\tilde{\omega}$, con $\hbar = 1$ la ecuación (3.23) se convierte en la expresión siguiente

$$\tilde{\omega} = \omega + i\pi\Gamma^+ \frac{g(\tilde{\omega})}{c^2 + |g(\tilde{\omega})|^2} \quad (3.24)$$

Lo primero que se debe notar de (3.24) es que ella describe tanto el llamado límite de Born (Dispersión clásica) si $c > 0$ y también el límite de la fase coherente o límite unitario para el cual $c = 0$. En segundo lugar, se debe notar que la parte real de la ecuación representa la energía $\varepsilon = \hbar\omega$, por otro lado la parte imaginaria define el llamado tiempo de vida promedio ($\tau(\tilde{\omega})$) de las cuasipartículas (pares de Cooper) [11]

$$\tau(\tilde{\omega}) = \frac{1}{2\text{Im}(\tilde{\omega})} \quad (3.25)$$

Por último, es importante resaltar que la ecuación (3.24), es una ecuación compleja y además autoconsistente, en donde existe un espacio de parámetros definidos por las constantes Γ^+ y c . La única manera de resolver esta ecuación de forma general es mediante la utilización de métodos numéricos.

3.2.1. Límites de la matriz de dispersión por impurezas no magnéticas

Límite de Born y Unitario

Si el campo de impurezas se puede considerar como una perturbación (es pequeño), lo cual significa que la fase de la función de onda del par de Cooper $\delta_0 \rightarrow 0$ entonces la matriz de dispersión puede calcularse dando como resultado el llamado *límite de Born*. Para dicho caso el potencial de impurezas

$$U_0 \ll \frac{\hbar^2}{m^*a^2} \quad (3.26)$$

donde " a " es el radio de acción del potencial de la impureza y m^* es la masa efectiva. En caso contrario cuando U_0 se considera grande es decir, para el cual $U_0 \gg \hbar^2/m^*a^2$

no se puede desarrollar la teoría de perturbaciones (por ejemplo el caso de los fermiones pesados, \mathbf{UPt}_3 y \mathbf{UBe}_{13}), sin embargo en este caso se presenta una resonancia muy acentuada que conduce a una fase constante ($\delta_0 = \pi/2$) [23]. Cuando se tiene estas condiciones, el nivel de energía se denomina cuasidiscreto y se obtiene que el momento angular del mismo es para cuasipartículas que interaccionan con dicho potencial con $l \neq 0$, por ejemplo el caso de un superconductor en estado triplete donde $l = 1$. Dicho límite es en teoría de dispersión usualmente llamado el *límite unitario* o *límite resonante* y, se caracteriza porque su estado cuasivirtual posee un tiempo de vida menor que el tiempo de vida en el límite de Born [26].

Si se hace un estudio en base a lo definido por estos límites, la ecuación (3.24) quedaria descrita como [11]

$$\tilde{\omega} = \omega + i \frac{n_{imp}}{\pi N_F \cot^2(\delta_0) + |g(\tilde{\omega})|^2} g(\tilde{\omega}) \quad (3.27)$$

para el límite unitario $\delta_0 = \pi/2$, se reescribe $\Gamma_U^+ = \Gamma^+$ y (3.27) toma la forma

$$\tilde{\omega} = \omega + \frac{i\pi\Gamma^+}{|g(\tilde{\omega})|} \quad (3.28)$$

de igual forma, para valores de $\delta_0 \neq \pi/2$ pero muy cercanos a cero, en el llamado límite de Born el valor de $\Gamma_B^+ = \Gamma^+ / \cot^2(\delta_0)$ y (3.27) queda redefinida en

$$\tilde{\omega} = \omega + i\pi\Gamma_B^+ |g(\tilde{\omega})| \quad (3.29)$$

3.2.2. Ecuación trascendental para la dispersión de impurezas a cero frecuencia

Un parámetro importante es la frecuencia resonante γ que se define como $i\gamma = \tilde{\omega}(\omega = 0)$ y que toma la forma

$$\gamma = \pi\Gamma^+ \frac{g(i\gamma)}{c^2 + |g(i\gamma)|^2} \quad (3.30)$$

$$g(i\gamma) = \left\langle \frac{\gamma}{\sqrt{\gamma^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2}} \right\rangle_{S.F} \quad (3.31)$$

Para pequeños potenciales de dispersión U_0 , la aproximación de Born aplica y $c \rightarrow \infty$, γ termina siendo proporcional a la concentración de impurezas y a $g(i\gamma)$; mientras que para potenciales de dispersión elevados al cual se le conoce como limite de dispersión unitario $c = 0$ y γ es inversamente proporcional a $g(i\gamma)$.

3.3. Densidad de Estados

En estado sólido y física de la materia condensada, la densidad de estados (DOS) de un sistema se describe como una función que indica el número de estados por unidad de energía que pueden ser ocupados por los electrones en cada nivel de energía [19]. Un alto valor de DOS a un nivel de energía específico significa que hay muchos estados ocupados. Por otro lado, si algún nivel de energía posee una DOS constante significa que todos los valores de energía dados el número de estados disponibles es constante; esto sucede por ejemplo en un gas de electrones libres bidimensional que obedecen la función de distribución de Fermi-Dirac. En términos de la función de Green promediada en el espacio \mathbf{k} encontrada en (3.15), la densidad de estados en presencia de impurezas se define como [16]

$$N_s(\tilde{\omega}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\tilde{\omega}) \quad (3.32)$$

donde la energía de la función de Green $G(\tilde{\omega})$ viene dada por la energía renormalizada encontrada en la ecuación (3.24)

$$G(\tilde{\omega}) = -i\pi N_F \left\langle \frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\tilde{\omega}^2 - |\Delta(\mathbf{k})|^2}} \right\rangle_{S.F} \quad (3.33)$$

La densidad de estados de un superconductor en presencia de impurezas no magnéticas puede ser reescrita de acuerdo a (3.32) como

$$\frac{N_s(\tilde{\omega})}{N_F} = \text{Re} \left\langle \frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\tilde{\omega}^2 - |\Delta(\mathbf{k})|^2}} \right\rangle_{S.F} \quad (3.34)$$

En el apéndice A, se hace el estudio detallado para la expresión (3.34) que debe ser reescrita para su tratamiento numérico, usualmente la densidad de estados superconductora se calcula utilizando las funciones elípticas de primer y segundo orden, sin embargo en este trabajo se utiliza una técnica alternativa haciendo uso del teorema de De Moivre, lo que permite expresar a (3.34) como

$$\frac{N_s(\tilde{\omega})}{N_F} = \left\langle \frac{\text{Re}(\tilde{\omega})}{\sqrt{2\rho_{\mathbf{K}}}} \sqrt{1 + \frac{a_{\mathbf{K}}}{\rho_{\mathbf{K}}}} \right\rangle_{S.F} + \left\langle \frac{\text{Im}(\tilde{\omega})}{\sqrt{2\rho_{\mathbf{K}}}} \sqrt{1 - \frac{a_{\mathbf{K}}}{\rho_{\mathbf{K}}}} \right\rangle_{S.F} \quad (3.35)$$

3.3.1. Densidad Residual de estados

La densidad de estados superconductora para el caso en que $\omega = 0$, se define como la *densidad residual de estados*, dicha magnitud física juega un papel fundamental en el estudio del comportamiento universal de ciertos coeficientes cinéticos como son la conductividad eléctrica y la conductividad térmica [28].

A continuación para el caso de un superconductor en estado triplete en una red cuadrada, se hace el análisis teórico de la densidad residual siguiendo lo descrito por ref.[17] pero tomando en cuenta que no solamente se hará el límite de Born, sino también el límite unitario por separado, como se describe en ref.[16]. La definición de la densidad residual viene dada por

$$N_s(\tilde{\omega}(\omega = 0)) = N_s(0) \quad (3.36)$$

la densidad de estados dada en la ecuación (3.34), puede ser reescrita para este caso como

$$\frac{N_s(0)}{N_F} = \left\langle \frac{C_0}{\sqrt{C_0^2 - |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}} \right\rangle_{S.F} \quad (3.37)$$

donde C_0 representa la cantidad normalizada $\tilde{\omega}(\omega = 0)/\Delta_0$. En los límites de dispersión C_0 cambia de valor como se detalla en el apéndice B. Para el límite de Born

$$C_0 = \left[\frac{\left(\zeta^2 - |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \right) + \sqrt{\left(|\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 - \zeta^2 \right)^2}}{2} \right]^{1/2} \quad (3.38)$$

para el límite unitario

$$C_0 = \left[\zeta \left(\frac{\zeta}{2} + \sqrt{\frac{\zeta^2}{4} + |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2} \right) \right]^{1/2} \quad (3.39)$$

para ambos casos, se hace uso del parámetro normalizado $\zeta = \Gamma^+/\Delta_0$.

Tomando en cuenta la ecuación de Abrikosov-Gorkov que se define en el apéndice B y mediante una expansión de potencias en función de la concentración de impurezas se encuentra

$$\zeta = -2 \log(T_c/T_{c0}) \quad (3.40)$$

donde T_{c0} representa la temperatura crítica cuando no existen impurezas. Con esto, se logra encontrar una expresión analítica para la frecuencia nula $\tilde{\omega}(\omega = 0)$ en función de la temperatura de transición. Esto permite realizar un análisis numérico de la densidad residual de estados en función de las diferentes temperaturas de transición (T_c) al variar la concentración de las impurezas tal y como fue realizado por ref. [16, 17] pero tomando en cuenta el enlace fuerte y la anisotropía de la brecha superconductora.

3.4. Brecha de Energía Superconductora

En lo que sigue, se define la brecha de energía superconductora como se muestra en el diagrama de Feynman de la Figura (3.3), el cual es un resultado a las ecuaciones de Gorkov [21]. Se busca estudiar la dependencia de la brecha de energía en un superconductor en relación con la temperatura y renormalizando la energía por la presencia de impurezas no magnéticas, para esto se resuelve la ecuación haciendo uso del formalismo de las funciones de Green en una aproximación de enlace fuerte.

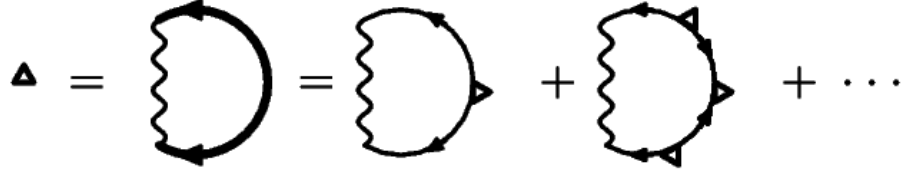


Figura 3.3: Diagrama de Feynman para la Brecha de Energía Superconductora

Para ser mas precisos y debido a que el valor máximo de la brecha Δ_0 en un superconductor no convencional es de unos pocos meV en relación con la energía del estado normal que es de varios meV , la expansión de la Figura (3.3) puede aproximarse hasta el primer término utilizando la definición de la función de Green anómala de la ecuación (2.50), por lo que dicha brecha puede expresarse como [11, 22]

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -T \sum_{k'} V_{\beta\alpha,\lambda\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') F_{\lambda\mu}(\tilde{\varepsilon}, \mathbf{k}') \quad (3.41)$$

Sabiendo que F es la función de Green anómala ya definida en ecuación (2.50). Para temperaturas finitas y para efectos del cálculo numérico, se lleva la energía ($\tilde{\varepsilon}$) a frecuencias de Matsubara, por lo tanto $\tilde{\varepsilon} \rightarrow i\hbar\tilde{\omega}_n$, con $\hbar = 1$ y $\omega_n = (2n + 1)\pi T$. Haciendo esto, se tiene ahora que

$$F_{\alpha\beta}(\tilde{\omega}_n, \mathbf{k}) = \frac{\Delta_{\alpha\beta}}{\tilde{\omega}_n^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2} \quad (3.42)$$

la ecuación de la Brecha de energía superconductora en frecuencias de Matsubara toma la siguiente forma

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -T \sum_n \sum_{k'} V_{\beta\alpha,\lambda\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') F_{\lambda\mu}(\tilde{\omega}_n, \mathbf{k}') \quad (3.43)$$

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -T \sum_n \sum_{k'} V_{\beta\alpha,\lambda\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\Delta_{\lambda\mu}}{\tilde{\omega}_n^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2} \quad (3.44)$$

Haciendo uso de la identidad de la ecuación (2.9), se expande la suma sobre \mathbf{k}' y queda

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -\frac{T}{(2\pi)^2} \sum_n \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_\mathbf{k}|} V_{\beta\alpha,\lambda\mu}(\mathbf{k}) \int d\xi \frac{\Delta_{\lambda\mu}(\mathbf{k})}{\tilde{\omega}_n^2 + \xi_\mathbf{k}^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2} \quad (3.45)$$

Se busca la solución a la integral en $d\xi$, para resolver esta integral se supone simetría electrón-hueco y luego se hace uso de la teoría de residuos. Llamaremos $\Lambda^2 = \tilde{\omega}_n^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) = 2\pi i \sum_a \text{Res}(f, a) \quad (3.46)$$

donde, $f(\xi) = \frac{1}{\Lambda^2 + \xi_\mathbf{k}^2}$

la suma de los residuos de esta función tienen la forma, $\sum_a \text{Res}(f, a) = \frac{1}{2i\Lambda}$

y el resultado de la integral es entonces

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi) = \frac{2\pi i}{2i\Lambda} = \frac{\pi}{\Lambda} = \frac{\pi}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2}} \quad (3.47)$$

de esta manera, introducimos el resultado en ecu.(3.45) para obtener

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -\frac{T\pi}{(2\pi)^2} \sum_n \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_\mathbf{k}|} V_{\beta\alpha,\lambda\mu}(\mathbf{k}) \frac{\Delta_{\lambda\mu}(\mathbf{k})}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2}} \quad (3.48)$$

Estudiando a continuación la naturaleza del potencial de interacción para un superconductor en estado triplete, se toma la solución de ref. [16], el cual queda descrito de forma normalizada como

$$V(\mathbf{k}) = \frac{-2V_0 (\sin^2(k_x a) + \sin^2(k_y a))}{\langle \sin^2(k_x a) + \sin^2(k_y a) \rangle_{S.F}} = \frac{-2V_0 |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}{\langle |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \rangle_{S.F}} \quad (3.49)$$

con este potencial ya definido, se reescribe la ecuación de la brecha superconductora comprendiendo el hecho de que pertenece a un estado con paridad triplete dado por dicho potencial

$$\Delta(\mathbf{k}) = \frac{2\pi TV_0 N_F}{\left\langle |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \right\rangle_{S.F.}} \sum_n \left[\frac{1}{(2\pi)^2 N_F} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_{\mathbf{k}}|} \frac{|\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2}} \right] \Delta(\mathbf{k}) \quad (3.50)$$

$$\Delta(\mathbf{k}) = \frac{2\pi TV_0 N_F}{\left\langle |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \right\rangle_{S.F.}} \sum_n \left\langle \frac{|\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2}} \right\rangle_{S.F.} \Delta(\mathbf{k}) \quad (3.51)$$

recordando que el parámetro de orden es proporcional a la brecha superconductora en la forma que se muestra en la ecuación (2.44), usando esta relación y simplificando $\Delta(\mathbf{k})$

$$\frac{1}{V_0 N_F} = \frac{2\pi T}{\left\langle |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \right\rangle_{S.F.}} \sum_n \left\langle \frac{|\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \Delta_0^2 |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}} \right\rangle_{S.F.} \quad (3.52)$$

Se busca tener la relación entre la brecha superconductora y la temperatura, para esto se conoce que cuando el metal alcanza la temperatura crítica de transición T_c entre el estado normal y el estado superconductor, el valor de la brecha superconductora allí es nula ($\Delta_0 = 0$). Al hacer esto, se introduce el parámetro T_c en la ecuación (3.52)

$$\frac{1}{V_0 N_F} = \frac{2\pi T_c}{\left\langle |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \right\rangle_{S.F.}} \sum_n \frac{\left\langle |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \right\rangle_{S.F.}}{|\tilde{\omega}_n|} \quad (3.53)$$

$$\frac{1}{V_0 N_F} = 2\pi T_c \sum_n \frac{1}{|\tilde{\omega}_n|} \quad (3.54)$$

En Matsubara se tiene que $\tilde{\omega}_n = \omega_n + \alpha$, donde $\alpha = \mathbf{Im}(\tilde{\omega}_n)$. Al buscar la solución para el límite en el cual $\alpha = 0$ (impurezas nulas) en el cual $T_c = T_{c0}$ y considerando que $\omega_n = (2n + 1)\pi T$, se tiene

$$\frac{1}{V_0 N_F} = \sum_{n \geq 0}^{\infty} \frac{1}{n + 1/2} \quad (3.55)$$

Esta serie en el infinito diverge, por lo tanto acotaremos la suma en un valor

crítico " n_c "

$$n_c = \frac{\omega_c}{2\pi T_{c0}} \quad (3.56)$$

Al tomar el resultado obtenido por ref.[11] para la solución de esta serie

$$\lim_{n_c \rightarrow \infty} \sum_{n \geq 0}^{n_c} \frac{1}{n + 1/2} = \ln(4n_c) + \ln(\gamma) = \frac{1}{V_0 N_F} + \ln\left(\frac{T_{c0}}{T}\right) \quad (3.57)$$

donde $\ln(\gamma) = C \approx 0,577$, es la conocida constante de Euler-Mascheroni. En resumi-
das cuentas,

$$\frac{1}{V_0 N_F} = 2\pi T \sum_n \frac{1}{|\omega_n|} - \ln\left(\frac{T_{c0}}{T}\right) \quad (3.58)$$

Con esta última relación y al combinar con la ecuación (3.52), se obtiene la
relación final de la brecha de energía superconductora en función de la temperatura

$$\ln\left(\frac{T_{c0}}{T}\right) = 2\pi T \sum_n \left[\frac{1}{|\omega_n|} - \frac{1}{\left\langle |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \right\rangle_{S.F.}} \left\langle \frac{|\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \Delta_0^2} |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2} \right\rangle_{S.F.} \right] \quad (3.59)$$

Con la finalidad de normalizar la temperatura ($0 \leq T \leq 1$) y tener notaciones
dimensionales, se hacen los siguientes cambios

$$T \longrightarrow T \cdot T_{c0} \quad \Delta_0 \longrightarrow \Delta_0 \cdot T_{c0} \quad \tilde{\omega}_n \longrightarrow \tilde{\omega}_n \cdot T_{c0} \quad (3.60)$$

$$\ln\left(\frac{1}{T}\right) = 2\pi T \sum_n \left[\frac{1}{|\omega_n|} - \frac{1}{\left\langle |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \right\rangle_{S.F.}} \left\langle \frac{|\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \Delta_0^2} |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2} \right\rangle_{S.F.} \right] \quad (3.61)$$

La siguiente condición consiste en hallar una solución general para (3.61), que
incluya $\alpha \neq 0$ y en una forma similar a lo hecho anteriormente. Se empieza por
buscar una expresión para T_c con $\Delta_0 = 0$ y $\tilde{\omega}_n = \omega_n + \alpha$

$$\ln\left(\frac{1}{T_c}\right) = 2\pi T_c \sum_n \left[\frac{1}{(2n+1)\pi T_c} - \frac{1}{(2n+1)\pi T_c + \alpha} \right] \quad (3.62)$$

$$\ln\left(\frac{1}{T_c}\right) = \sum_n \frac{\alpha}{(n+1/2)(n+1/2 + \alpha/2\pi T_c)} \quad (3.63)$$

T está normalizada y $T_c = 1$, se toma la solución de (3.63) y se combina con la ecuación (3.61) para obtener la forma numérica generalizada de la brecha de energía superconductora en presencia de impurezas no magnéticas

$$\ln\left(\frac{1}{T}\right) + \sum_n \frac{\alpha}{(n+1/2)(n+1/2 + \alpha)} - 2\pi T \sum_n \left[\frac{1}{|\omega_n|} - \frac{1}{\langle |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \rangle_{S.F.}} \left\langle \frac{|\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}{\sqrt{\tilde{\omega}_n^2 + \Delta_0^2} |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2} \right\rangle_{S.F.} \right] = 0 \quad (3.64)$$

Si bien, esta última ecuación no es lineal, se puede resolver haciendo uso de herramientas de cálculo numérico, que permiten tener resultados del comportamiento de Δ_0 como una función de la temperatura (T).

Capítulo 4

Resultados

En este capítulo se muestra el comportamiento de los parámetros previamente descritos, se quiere estudiar la influencia de la concentración de impurezas del tipo no magnéticas sobre dichos parámetros para un superconductor en estado triplete. En capítulo anterior se dijo que las impurezas no magnéticas no destruyen la superconductividad en superconductores convencionales, lo que se le conoce como el teorema de Anderson, y que la temperatura crítica y la brecha de energía son las mismas como en un superconductor convencional sin impurezas. Sin embargo, en superconductores no convencionales esta afirmación no es válida.

El tiempo de vida medio de las cuasipartículas $\tau(\tilde{\omega})$, es inversamente proporcional a $\mathbf{Im}(\tilde{\omega})$, haciendo uso de esta relación, se trazan diversas curvas de la parte imaginaria de la energía renormalizada del superconductor, para visualizar el comportamiento de $\tau(\tilde{\omega})$ en los diferentes límites de dispersión y para distintos valores de concentración de impurezas (Γ^+/Δ_0).

La Figura (4.1), muestra el comportamiento del tiempo de vida de los pares de Cooper en función de la energía del superconductor y para diversas formas de dispersión para una concentración de impurezas no magnéticas $\Gamma^+/\Delta_0 = 0,15$. En el límite unitario ($c=0$), $\mathbf{Im}(\tilde{\omega})$ es mayor siempre para cualquier valor de energía, lo que corrobora el hecho de que a mayor potencial U_0 , el $\tau(\tilde{\omega})$ es siempre menor. El mínimo de dicha curva representa la posición de la conocida singularidad de Van Hove, y su valor de energía corresponde con $\omega/\Delta_0 \approx 1,4$. Dicha singularidad, corresponde con

el mismo valor de energía para cualquier valor de c cuando $\Gamma^+/\Delta_0 \approx 0$, pero se ve afectado por las concentraciones altas de dichas impurezas.

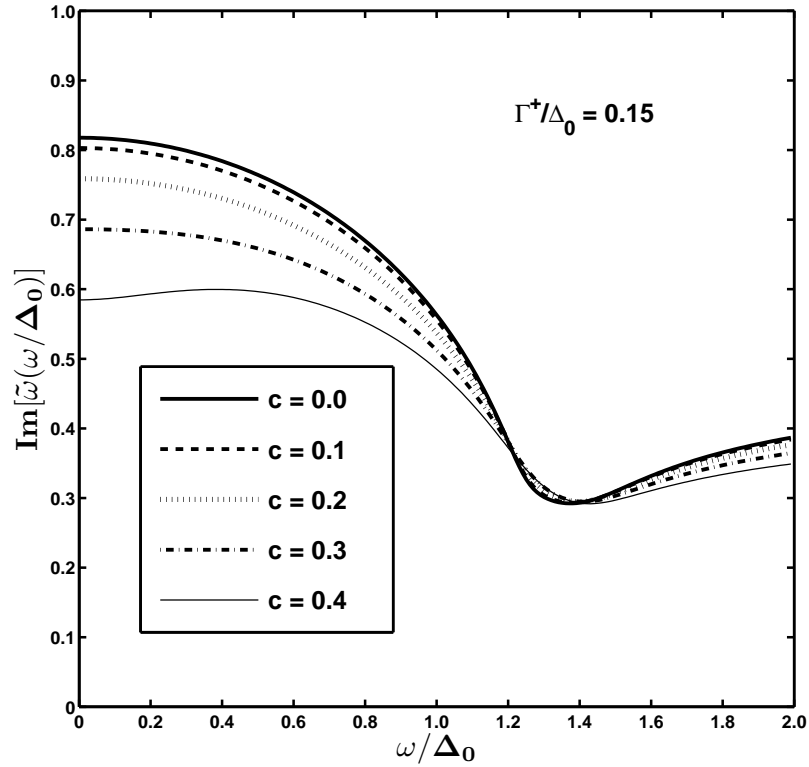


Figura 4.1: Tiempo de vida medio del par de Cooper en función de la energía del superconductor

Por otro lado, en la Figura (4.2) se observa la influencia que tienen las impurezas en $\tau(\tilde{\omega})$. En este caso, se presenta solo el límite unitario ($c = 0$), es claro que al aumentar la concentración Γ^+/Δ_0 , el tiempo de vida medio $\tau(\tilde{\omega})$ disminuye. Para valores grandes de energía (ω/Δ_0), las pequeñas concentraciones de impuras no ejercen ningún efecto sobre el superconductor.

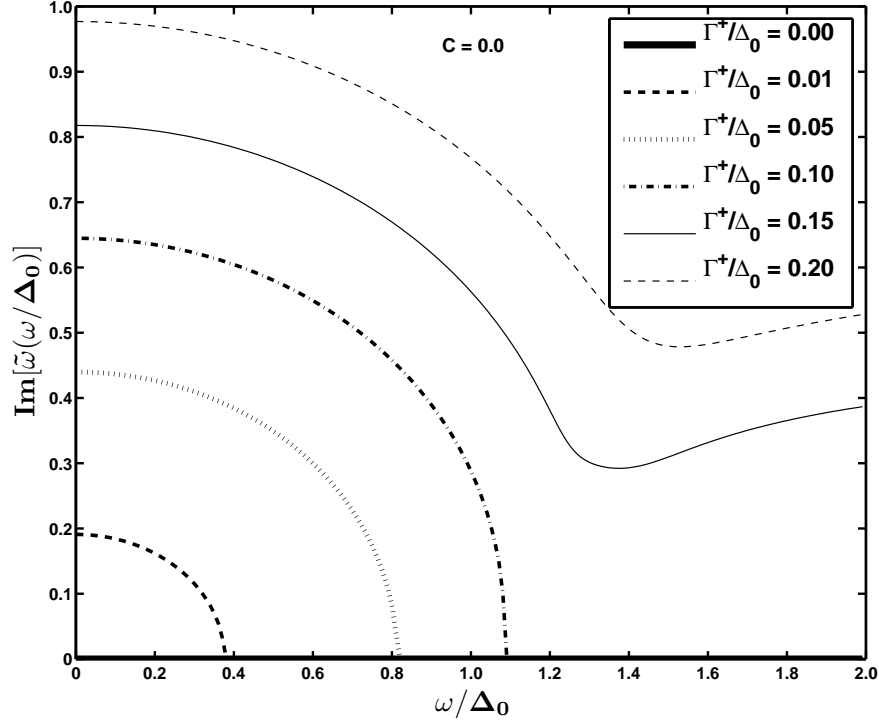
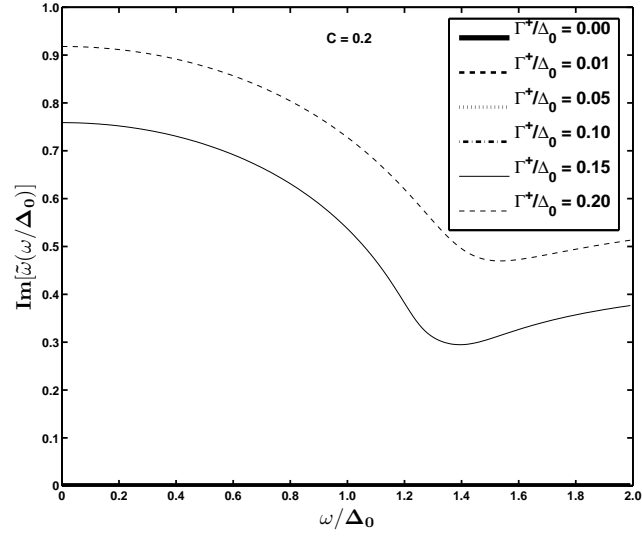
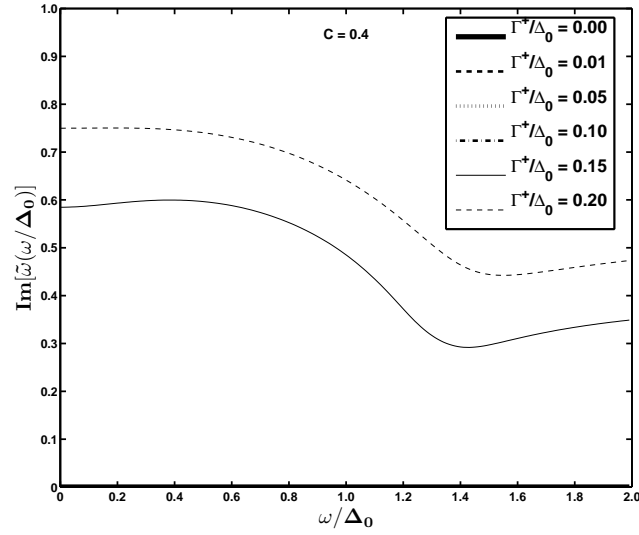


Figura 4.2: $\text{Im}(\tilde{\omega})$ vs ω/Δ_0 para el límite unitario.

Al hacer un análisis para pequeños potenciales de dispersión ($U_0 \rightarrow 0$) en las aproximaciones de Born, sean los casos $c = 0,2$ y $c = 0,4$, se muestran en las Figuras (4.3) y (4.4) respectivamente. Los valores bajos de Γ^+/Δ_0 no influyen en el superconductor ya que el potencial U_0 es muy pequeño, se necesitan grandes concentraciones de impurezas para estos potenciales bajos.

Figura 4.3: $\text{Im}(\tilde{\omega})$ vs ω/Δ_0 para $c = 0,2$ Figura 4.4: $\text{Im}(\tilde{\omega})$ vs ω/Δ_0 para $c = 0,4$

Las curvas de la Figura (4.5), muestran el comportamiento de la ecuación transcendental (3.30) para la dispersión de impurezas no magnéticas a frecuencia cero ($\omega = 0$)

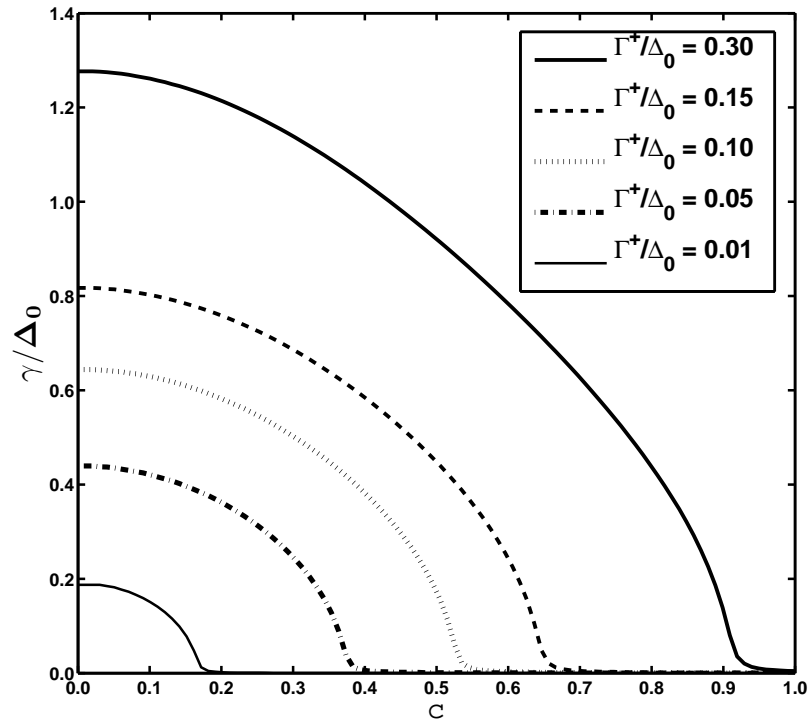


Figura 4.5: γ como función del parámetro de dispersión c .

La línea de γ/Δ_0 con valor de impurezas $\Gamma^+/\Delta_0 = 0,15$, fue la utilizada para trazar los resultados de la Figura (4.1). Note que para esta concentración de impurezas cuando $c = 0,0$, $\gamma/\Delta_0 \approx 0,8$. dicho valor es el mismo para $\mathbf{Im}(\tilde{\omega})$.

Al estudiar la densidad de estados superconductor (DOS), mostrado en la Figura (4.6) para el caso del límite unitario y las Figuras (4.7), (4.8) para los casos Born $c = 0,2$ y $c = 0,4$ respectivamente. La DOS como función de la energía normalizada por Δ_0 . En un superconductor del tipo convencional, la DOS presenta una singularidad para $\omega = \Delta_0$, y para valores de energía por debajo de Δ_0 es una región prohibida. En superconductores del tipo no convencional, por debajo de Δ_0 existen estados ocupados.

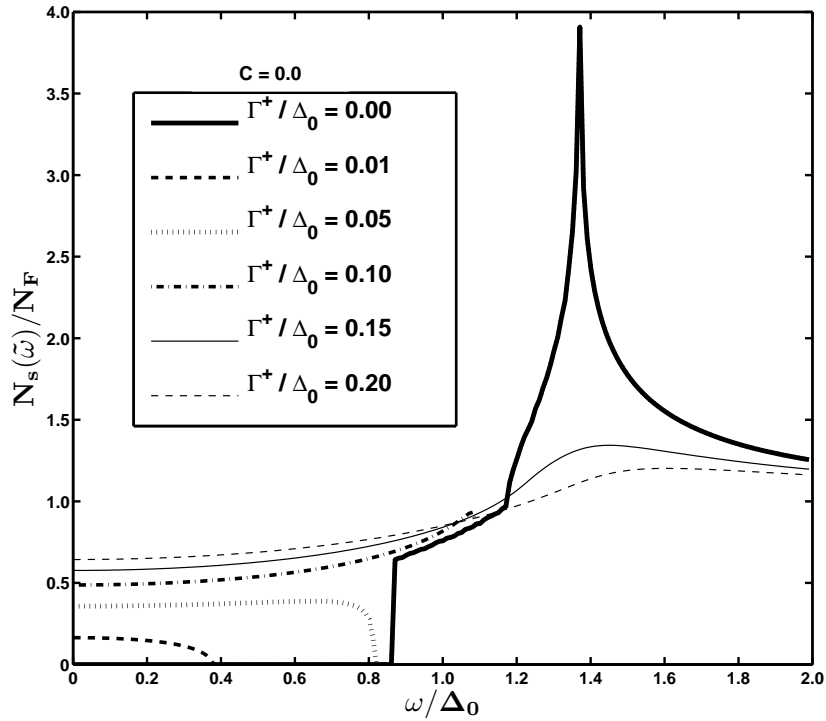


Figura 4.6: Densidad de estados para un sistema puro y otros que contienen efectos de impurezas en el límite unitario

En el límite unitario, se observa la presencia de estados ocupados por los pares de Cooper para $\omega = 0$ en valores no nulos de Γ^+/Δ_0 , este fenómeno se le conoce como densidad residual de estados. En el caso de $\Gamma^+/\Delta_0 = 0$ la densidad residual no existe. El comportamiento en el límite de dispersión débil $c = 0,2$, para bajas con-

centraciones de impurezas no existe densidad residual, se necesitan concentraciones altas de impurezas para que los pares de Cooper ocupen estados cuando $\omega = 0$.

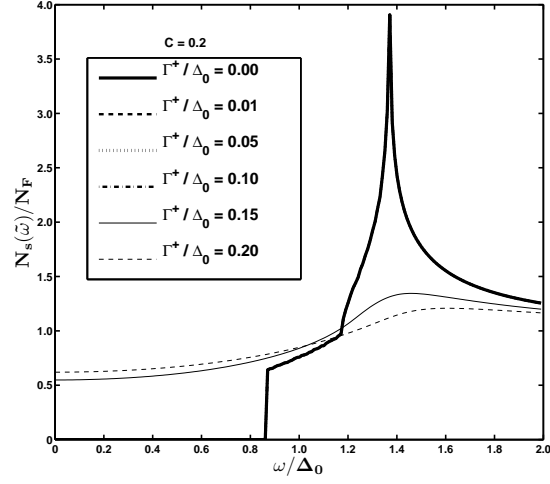


Figura 4.7: Densidad de estados con dispersión de impurezas a $c = 0,2$

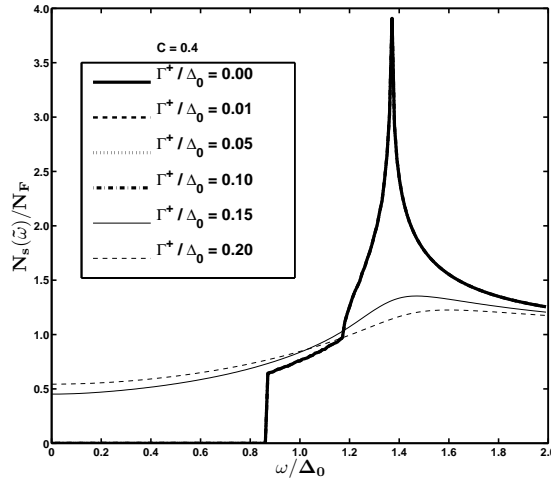


Figura 4.8: Densidad de estados con dispersión de impurezas a $c = 0,4$

Una manera de ver la densidad residual, es haciendo uso de la ecuación de Abrikosov-Gorkov para obtener una relación de ella como función de la temperatura. La ecuación (3.37), describe dicho comportamiento y dependiendo del valor de C_0 , se pueden encontrar resultados para el límite de Born y unitario como se muestran en la Figura (4.9).

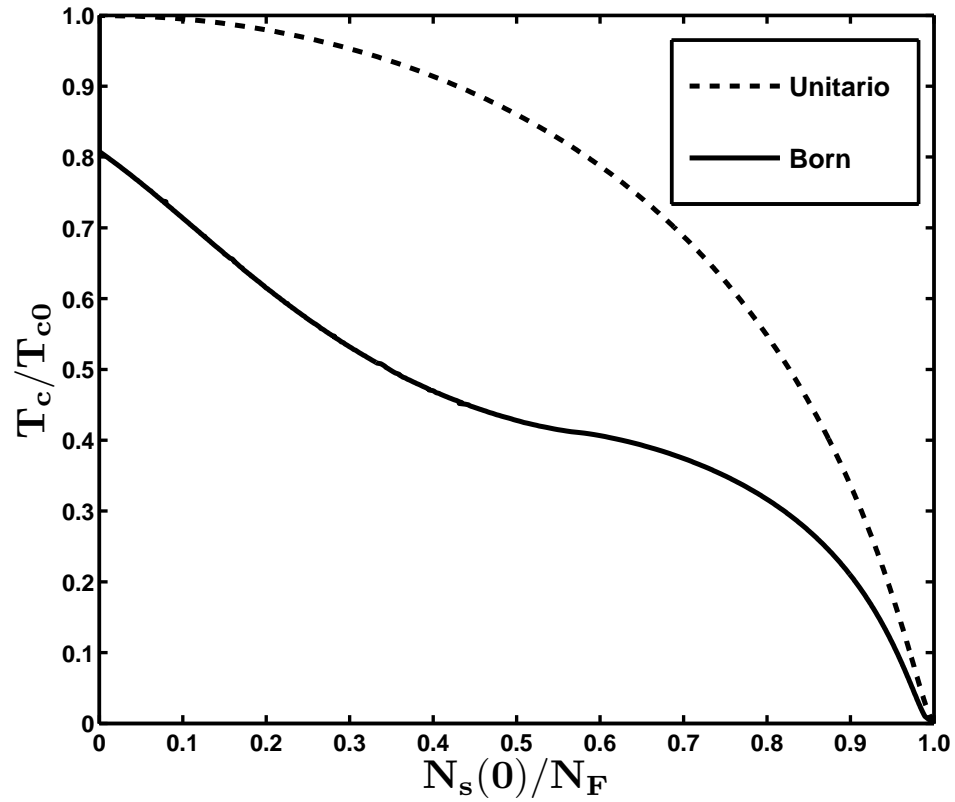


Figura 4.9: Temperatura de transición en función de la densidad residual de estados.

Otro de los objetivos de este trabajo es visualizar el comportamiento de la brecha de energía superconductora como función de la temperatura crítica, como se expresa en la ecuación (3.64) para el estado triplete. A continuación se hace el estudio para la dispersión unitaria y un caso Born ($c = 0,2$)

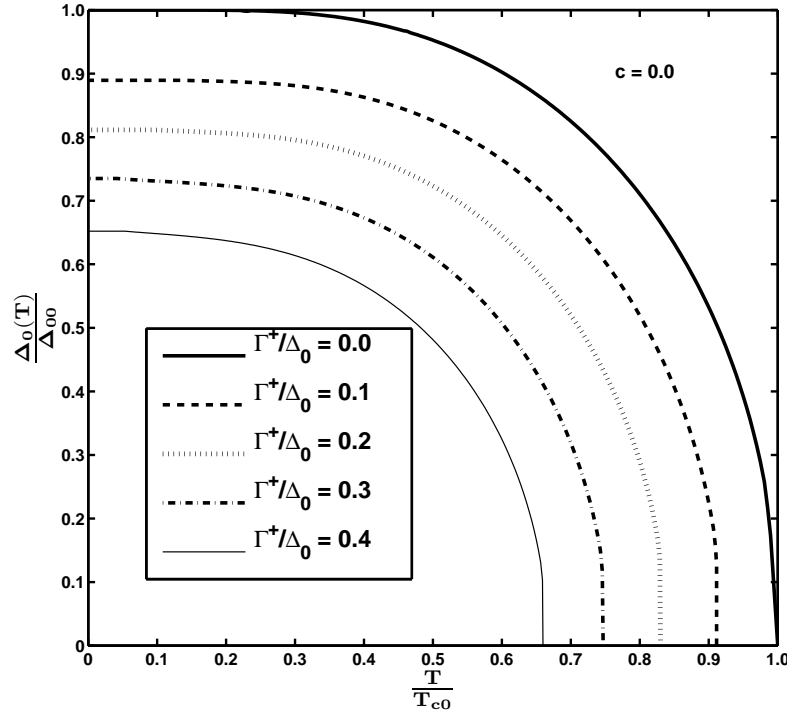


Figura 4.10: Brecha de energía en función de la temperatura crítica para $c = 0,0$

Los resultados de la Figura (4.10), describen la brecha de energía (Δ_0) para el límite unitario. Cuando $\Gamma^+/\Delta_0 = 0$, la temperatura crítica de transición (T_c) toma el valor de T_{c0} . El máximo valor de Δ_0 se encuentra siempre en el cero absoluto ($T/T_{c0} = 0$) y, su valor mínimo se encuentra en el punto de transición entre el estado superconductor y el estado de un metal normal. El análisis cuando se tiene presencia de impurezas se hace trazando diferentes curvas fijando valores $\Gamma^+/\Delta_0 = (0,0,0,1,0,2,0,3,0,4)$; Las curvas demuestran un decaimiento de T_c a medida que se incrementa Γ^+/Δ_0 , de forma análoga disminuye también Δ_0

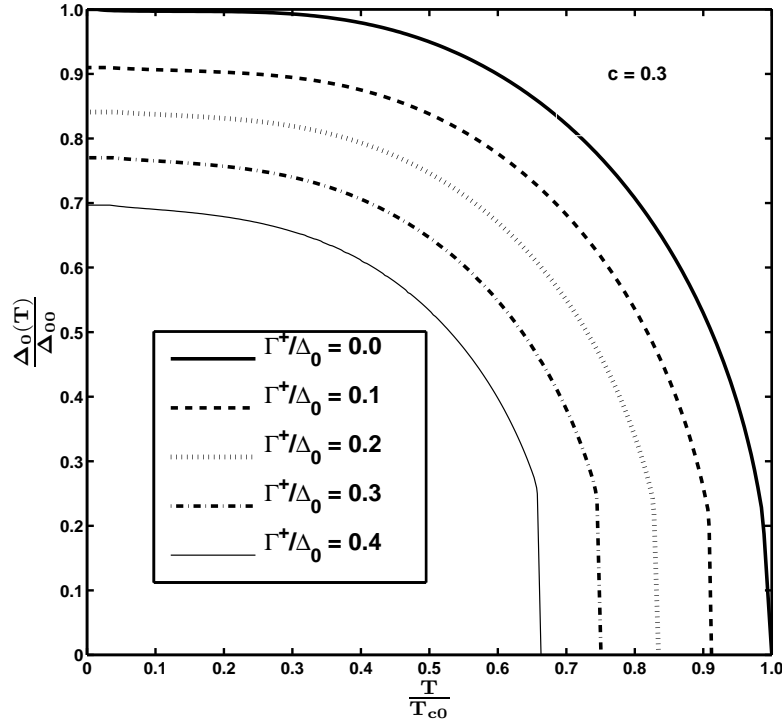


Figura 4.11: Brecha de energía en función de la temperatura crítica para $c = 0,3$

En uno de los límites de dispersión $c = 0,3$, los resultados de la brecha se muestran en la Figura (4.11) y el análisis es similar al del límite unitario, solo que en este caso el potencial de la impureza es menor, lo que hace que la disminución de Δ_0 sea menor que el de una dispersión unitaria. Es importante hacer notar que para $\Gamma^+/\Delta_0 = 0$, la forma de dispersión no influye, generando curvas similares para $c = 0$ y $c = 0,3$. Estas gráficas de la brecha, pueden verse como un diagrama de fases, debajo de la curva se encuentra el estado superconductor y por encima de ella el estado de un metal normal.

En las Figuras (4.12) y (4.13), se hace el estudio de la brecha normalizando sobre T_c para los casos de $c = 0$ y $c = 0,3$ respectivamente. El análisis es similar al descrito

anteriormente para el decrecimiento Δ_0 .

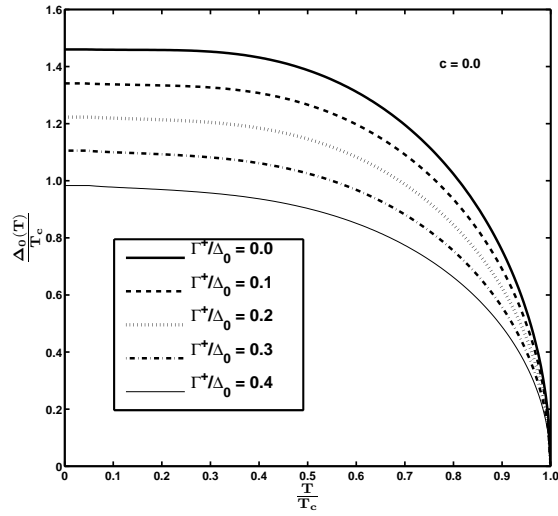


Figura 4.12: Brecha de energía en función de la temperatura crítica para $c = 0,0$

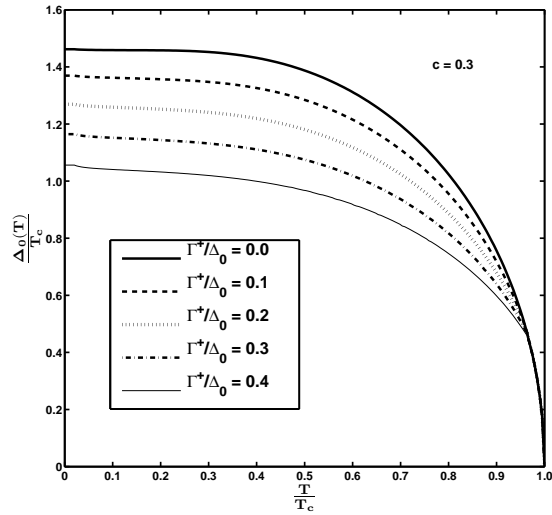


Figura 4.13: Brecha de energía en función de la temperatura crítica para $c = 0,3$

Conclusiones

En este trabajo he estudiado la superconductividad no convencional para un estado triplete en una red cuadrada.

En orden de realizar este estudio, he incluido el modelo de enlace fuerte con parámetros $(E_0 - \mu)$ y t , tomados de experimentos de ARPES [9], el cual es mas realista que el considerar una superficie de Fermi circular.

Como objetivo crucial de esta tesis, se consideró el efecto de impurezas no magnéticas en la técnica de renormalización de la auto-energía del superconductor. Ello hizo posible reproducir los resultados del trabajo de K. Miyake y O. Narikiyo [16], para la densidad de estados superconductora, pero se ha agregado a referido artículo, el estudio de la dispersión por impurezas no solo en el límite unitario, sino también en el límite de Born.

El tiempo de vida de los pares de Cooper ligados a la impureza, la brecha de energía y la densidad residual de estados como función de la temperatura crítica, son otras cantidades físicas que se estudiaron y calcularon numéricamente en esta tesis.

Es interesante hacer notar que para el caso de segundos y terceros vecinos, K. Miyake y O. Narikiyo postulan que el vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ debería tener valores para Δ_1 y Δ_2 , para considerar segundos y terceros vecinos respectivamente.

Como conclusión principal se ha encontrado que existen estados fuertemente ligados para el caso del límite unitario y, en el caso de un superconductor triplete no

convencional con brecha el tipo (??) se encuentra en el límite unitario tal y como lo muestra la Figura (4.9).

Como trabajo a futuro, propongo que se estudie el comportamiento de la brecha de energía superconductora y del resto de cantidades físicas, para valores no nulos de Δ_1 y Δ_2 .

Apéndice A

Ecuación numérica de la densidad de estados superconductora

De acuerdo con la ecuación(3.34), la densidad de estados superconductora puede reescribirse como

$$\frac{N_s(\tilde{\omega})}{N_F} = Re \left\langle \frac{\omega + i\alpha}{\sqrt{\omega^2 - \alpha^2 + 2i\omega\alpha - \Delta_0^2 |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}} \right\rangle_{S.F} \quad (1)$$

El parámetro α representa la parte compleja de $\tilde{\omega}$. Se usa la ecuación de De Moivre, con los siguientes cambios

$$a_{\mathbf{K}} = \omega^2 - \alpha^2 - \Delta_0^2 |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \quad b = 2\omega\alpha \quad \rho_{\mathbf{K}} = \sqrt{a_{\mathbf{K}}^2 + b^2} \quad (2)$$

De Moivre indica que

$$a_{\mathbf{K}} + ib = \sqrt{a_{\mathbf{K}}^2 + b^2} \exp^{i\theta} = \rho_{\mathbf{K}} \exp^{i\theta} \quad (3)$$

$$\sqrt{a_{\mathbf{K}} + ib} = \sqrt{\rho_{\mathbf{K}}} \exp^{i\theta/2} = \sqrt{\rho_{\mathbf{K}}} (\cos(\theta/2) + i \sin(\theta/2)) \quad (4)$$

con los cambios trigonométricos

$$\cos(\theta) = \frac{a_{\mathbf{K}}}{\rho_{\mathbf{K}}} \quad \sin(\theta) = \frac{b}{\rho_{\mathbf{K}}} \quad (5)$$

resulta

$$\cos(\theta/2) = \sqrt{\frac{1 + \cos(\theta)}{2}} = \sqrt{\frac{\rho_{\mathbf{K}} + a_{\mathbf{K}}}{2\rho_{\mathbf{K}}}} \quad (6)$$

$$\sin(\theta/2) = \sqrt{\frac{1 - \cos(\theta)}{2}} = \sqrt{\frac{\rho_{\mathbf{K}} - a_{\mathbf{K}}}{2\rho_{\mathbf{K}}}} \quad (7)$$

con estos cambios y el álgebra adecuada, se llega a la conclusión

$$\frac{N_s(\tilde{\omega})}{N_F} = Re \left\langle \frac{\omega + i\alpha}{\sqrt{\rho_{\mathbf{K}}} (\cos(\theta/2) + i \sin(\theta/2))} \right\rangle_{S.F} \quad (8)$$

$$\frac{N_s(\omega)}{N_F} = \left\langle \frac{Re(\tilde{\omega})}{\sqrt{2\rho_{\mathbf{K}}}} \sqrt{1 + \frac{a_{\mathbf{K}}}{\rho_{\mathbf{K}}}} \right\rangle_{S.F} + \left\langle \frac{Im(\tilde{\omega})}{\sqrt{2\rho_{\mathbf{K}}}} \sqrt{1 - \frac{a_{\mathbf{K}}}{\rho_{\mathbf{K}}}} \right\rangle_{S.F} \quad (9)$$

Apéndice B

En esta sección, se toma las siguientes normalizaciones

$$u = \tilde{\omega}/\Delta_0 \quad x = \omega/\Delta_0 \quad \zeta = \Gamma^+/\Delta_0 \quad C_0 = \tilde{\omega}(\omega = 0)/\Delta_0 \quad (10)$$

Ecuación de Abrikosov-Gorkov

La ecuación de Abrikosov-Gorkov viene dada por

$$\log(T_c/T_{c0}) = \psi(1/2) - \psi(1/2 + n_{imp}) \quad (11)$$

donde, $n_{imp} = \Gamma^+/2\pi T_c$ y ψ es la función Digamma. De ref.[13], se conoce que

$$\psi(1/2 + X) - \psi(1/2) = \psi'(1/2)X \quad (12)$$

con $\psi'(1/2) = \pi^2/2$ y sabiendo que $\Delta_0 = 1,76T_c$ se encuentra que

$$\zeta = -2\log(T_c/T_{c0}) \quad (13)$$

Ecuación de $\tilde{\omega}(\omega = 0)$ para la dispersión de Born

$$C_0 = \zeta \left(\frac{C_0}{\sqrt{C_0^2 - |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}} \right) \quad (14)$$

$$C_0^4 = C_0^2 |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 - \zeta^2 C_0^2 \quad (15)$$

resolviendo para C_0 , resulta

$$C_0 = \left[\frac{\left(\zeta^2 - |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \right) + \sqrt{\left(|\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 - \zeta^2 \right)^2}}{2} \right]^{1/2} \quad (16)$$

Ecuación de $\tilde{\omega}(\omega = 0)$ para la dispersión de Unitaria

$$C_0 = \zeta \left(\frac{\sqrt{C_0^2 - |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2}}{C_0} \right) \quad (17)$$

$$C_0^4 = \zeta^2 C_0^2 \left(C_0^2 + |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2 \right) \quad (18)$$

resolviendo para C_0 , resulta

$$C_0 = \left[\zeta \left(\frac{\zeta}{2} + \sqrt{\frac{\zeta^2}{4} + |\mathbf{d}(\mathbf{k})|^2} \right) \right]^{1/2} \quad (19)$$

Referencias

- [1] H. K. Onnes, Commun. Phys. Lab. **12**, 120 (1911).
- [2] W. Meissner and R. Ochsenfeld, Naturwissenschaften **21**, 787 (1933)
- [3] F. London y H. London, Proc. Roy. Soc. **A149**, 71 (1935).
- [4] V. L. Ginzburg y L. D. Landau, J. Exp. Theoret. Phys.(U.S.S.R.) **20**, 1064 (1950).
- [5] J. Bardeen, L. Cooper and J. Schrieffer Phys. Rev. **108** (1957) pp. 1175
- [6] B. Betnors and K. Mueller Z. Phys. **64** (1986) pp. 189
- [7] J. Annet. Unconventional superconductivity. *Contemporary Physics*, 36:423, 1995
- [8] P. Contreras, Symmetry Properties and sound waves in the Unconventional Superconductor Sr_2RuO_4 (2005)
- [9] Ari Deibert Palczewski. *Angle-resolved photoemission spectroscopy* (ARPES) studies of cuprate superconductors. PhD thesis, Iowa State University, 2010.
- [10] De Gennes, P. G. *Superconductivity of metals and alloys*. Addison-Wesley, New York, 1989.
- [11] V. Mineev and K. Samokhin, *Introduction to unconventional superconductivity* (Gordon and Breach, Amsterdam, 1999).
- [12] F. Bloch, Z. Physik **52**, 555 (1928).

-
- [13] N. Kopnin, *Theory of nonequilibrium superconductivity* (Oxford science publications, Oxford, 2001).
- [14] T. Rice and M. Sigrist. Sr_2RuO_4 : an electronic analogue of 3He ? J. Phys. Condens. Matter, 7:L643, 1995.
- [15] P. W. Anderson. *Theory of dirty superconductors*. J. Phys. Chem. Solids, 1959.
- [16] K. Miyake and O. Narikiyo, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) pp. 1423
- [17] K. Maki and E. Puchkaryov. *Impurity effects in p-wave superconductors*. Europhys. Lett., **50** (4), pp. 533-539 (2000)
- [18] S. F. Edwards (1961) The electronic structure of disordered systems, *Philosophical Magazine*, 6:65, 617-638,
- [19] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, Berkeley, 2005
- [20] L. Gorkov Soviet Sci. Rev. A. Phys. **9** (1987) pp. 1
- [21] Funciones de Green L. Levitov y A. Shitov *Problemas y Soluciones*. Editorial Ciencia (Moscu, 2002)(En Ruso)
- [22] M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63** (1991) pp. 239
- [23] Landau y Lifshitz. *Mecánica Cuántica no relativista*, chapter 9. Editorial Reverte, 1983.
- [24] Y. Bang. *Resonant impurity scattering in the unconventional superconductors.*, EDP Sciences, 2012
- [25] Y. Nambu. *Physical Review*, 117(3), 1960.
- [26] E. Schachinger and J. P. Carbotte. *Physical Review B*, 67, 2003.
- [27] R. Balian and N. Werthamer, Phys. Rev. **131** (1963) pp. 1553
- [28] M. Walker and P. Contreras. *Phys. Rev. B*, 66:214508, 2002.