

UNIVERSIDAD DE LOS ANDES

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA



Densidad residual de estados en presencia de impurezas en un superconductor de alta temperatura

Trabajo Especial de Grado
Presentado ante la Ilustre Universidad de Los Andes
Para Optar al Título de
LICENCIADO EN FÍSICA

Presentado Por
BR. DANIEL UZCÁTEGUI CONTRERAS

Tutor: DR. PEDRO CONTRERAS

Mérida, Mayo 2014

Agradecimientos

Al Dr. Pedro Contreras por su valiosa guía para elaborar este trabajo, al compañero Ender Ochoa por su desinteresada colaboración y a todos los profesores y compañeros de la Facultad de Ciencias de la Universidad de los Andes, por su extraordinaria guía y estímulo.

A mi Mayor (B) Engelbert Daniel Gonzlez, por su inconmensurable apoyo.

Un agradecimiento especial al Ing. Juan Antonio Moreno Ortega de Daxa de Venezuela, por el grandísimo aporte en el desarrollo de herramientas para la solución de temas numéricos.

Resumen

La mayor parte de los superconductores de alta temperatura son compuestos cuya estructura cristalina contiene planos de CuO_2 . Se cree que en estos planos se despliegan las supercorrientes, esto permite emplear la aproximación de enlace fuerte para una red bidimensional que describe el estado normal del superconductor. Además, por evidencia experimental se sabe que los superconductores de alta temperatura presentan simetría $d_{x^2-y^2}$. Teniendo en cuenta estas consideraciones, se hace un análisis numérico del efecto de las impurezas no magnéticas (descrito por la técnica de Edwards, que adiciona un término a la energía, llamado la autoenergía Σ_0) sobre la temperatura crítica, T_c , y la brecha de energía, $\Delta(T)$. También se estudia el comportamiento del tiempo de vida medio, τ_s , de los pares de Cooper interactuando con las impurezas, dado por la parte imaginaria de la energía corregida, llamada auto-energía renormalizada, para distintos concentraciones de impurezas n_{imp} . Finalmente, se calcula la densidad de estados para el límite unitario y límite de Born, y los estados ocupados a cero energía, llamados estados residuales.

Índice general

Agradecimientos	2
Resumen	3
1. Introducción	7
1.1. Superconductividad Convencional	9
1.2. Superconductividad No Convencional	11
2. Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes para una red cuadrada con simetría $d_{x^2-y^2}$	15
2.1. Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes para un estado singlete	15
2.2. Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes para una red cuadrada con interacción entre primeros vecinos	22
3. Efecto de impurezas no magnéticas en Superconductores de alta temperatura	26
3.1. Impurezas no magnéticas en un metal normal (Técnica de Edwards) .	27
3.2. Formalismo de la matriz \hat{T}	29
3.2.1. Límites de la matriz de dispersión	32
3.3. Ecuación de la Brecha Superconductora	33
3.4. Densidad de Estados en un superconductor de alta temperaturas . . .	40
4. Resultados	45
4.1. Brecha de Energía	45
4.2. Tiempo de vida media de la cuasipartícula	49

4.3. Densidad de Estados	52
Conclusiones	56
Apéndice A	57
Apéndice B	60
Apéndice C	61
Referencias	63

Índice de figuras

1.1. Descubrimiento de la Superconductividad y Efecto Meissner	8
1.2. Evolución de la Temperatura Crítica	9
1.3. Armónicos Esféricos	12
1.4. Simetría $d_{x^2-y^2}$	13
1.5. Simetría d_{xy}	13
2.1. Modelos de Red Cuadrada	16
2.2. Espectro de energía en el estado normal	23
2.3. Brecha de energía	24
3.1. Diagrama de Feynman para la función de Green encamisada y pro- mediada por impurezas no magnéticas	28
3.2. Diagrama de Feynman para la auto-energía renormalizada por impu- rezas no magnéticas	29
4.1. $\Delta(T)/\Delta_{00}$ vs T_c/T_{c0}	47
4.3. $\text{Im}(\tilde{\omega})$ para distintos valores de Γ^+ en función de ω	51
4.4. $N(\omega)/N_F$ vs ω/Δ_0	52
4.5. Densidad de Estados normalizada en función de la frecuencia reducida por Δ_0 para distintos valores ζ	53
4.6. $N(0)/N_F$ vs T_c/T_{c0}	54
4.7. Resultados experimentales	55

Capítulo 1

Introducción

La superconductividad fue descubierta en 1911 por H. Kamerlingh Onnes [1] en la ciudad de Leiden, Países Bajos, tres años después que pudo licuar¹ el Helio, lo cual le dio la técnica de refrigeración necesaria para alcanzar temperaturas de pocos kelvin. Lo que Kamerling observó fue que la resistencia eléctrica de varios metales, tales como el mercurio (ver Fig.1.1), el plomo y el estaño, desaparecía completamente a una temperatura crítica T_c .

El próximo gran descubrimiento en este sentido fue el *diamagnetismo perfecto*, en 1933 por Meissner y Ochsenfeld [2]. Ellos hallaron que un campo magnético es expulsado al ingresar en un superconductor, a este efecto se le conoce como *Efecto Meissner*. También encontraron que tal campo, en una muestra de un material superconductor en estado normal, es expelido cuando es enfriado por debajo de T_c (ver Fig.1.1). La existencia de este *efecto Meissner* reversible implica que la superconductividad será destruida por un campo magnético crítico H_c .

En 1935 los hermanos F. y H. London [4] propusieron dos ecuaciones que describen las propiedades electrodinámicas de los superconductores, lo que despertó gran interés en estos materiales. En 1950 Ginzburg y Landau [5] introdujeron una función de onda compleja ψ como un parámetro de orden, dentro de la teoría general de tran-

¹*Licuefacción*: pasar un gas a estado líquido disminuyendo la temperatura o aumentando la presión.

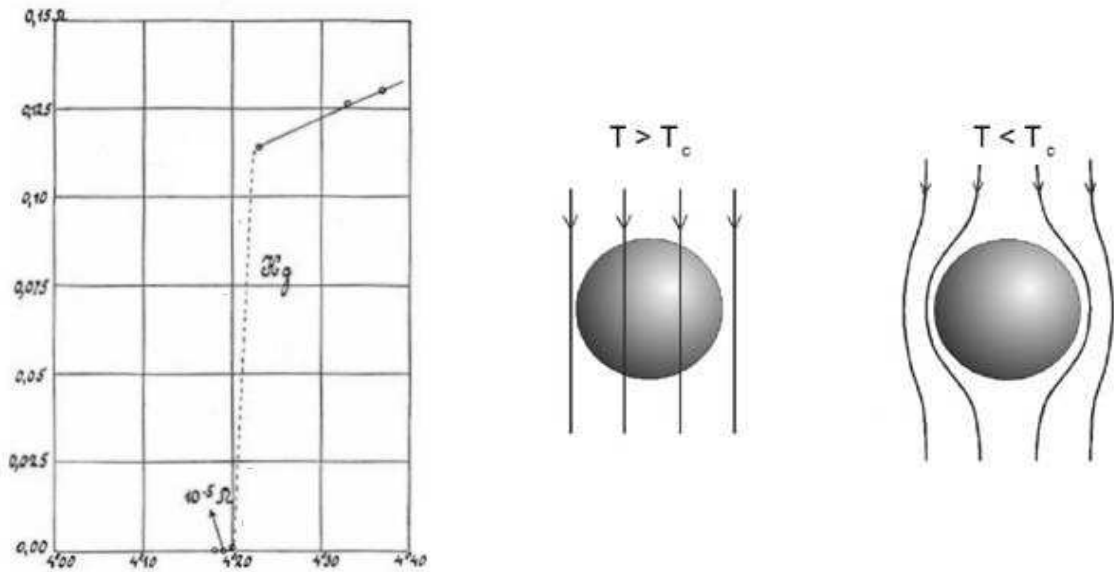


Figura 1.1: *Izquierda:* Gráfico original en el que Kamerlingh muestra el descubrimiento de la superconductividad en el Hg. En el eje horizontal la temperatura en Kelvins, en el eje vertical la resistencia en ohmios, tomado de [3]. *Derecha:* Efecto Meissner.

siciones de segundo orden de Landau, una teoría fenomenológica, donde ψ describe los electrones superconductores. En 1957 Bardeen, Cooper y Shreiffier propusieron la teoría microscópica BCS, en la cual demuestran que incluso una débil interacción atractiva entre electrones, tal como la causada por la interacción electrón-fonón, produce inestabilidad en el estado base del condensado de Fermi, favoreciendo la formación de pares ligados de electrones con iguales magnitudes de momentum y espín, pero, con direcciones opuestas, los llamados pares de Cooper, que constituyen los portadores de carga superconductores.

Luego del hallazgo de Kamerlingh muchos superconductores fueron descubiertos, y la temperatura crítica se elevó cada año (ver Fig. 1.2). Por 1973 la T_c había alcanzado los 22.3 K con el Nb_3Ge [6]. Sleight reportó en 1975 una T_c de 13 K en $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$, la cual varía para distintas proporciones de Bi/Pb. Por la década de 1980 fue hallado en Suiza el material PbMo_6S_8 , con una temperatura crítica de 16 K.

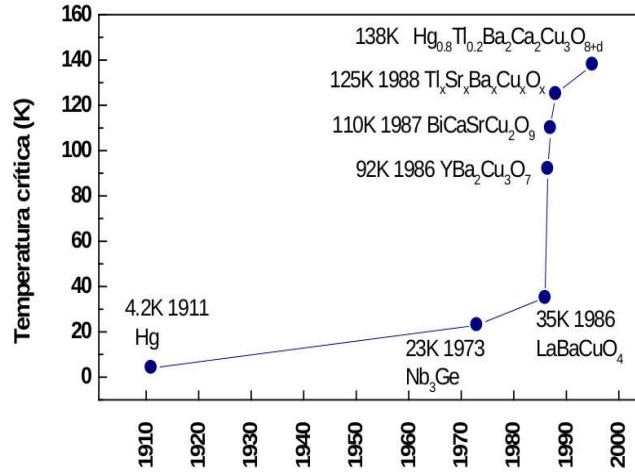


Figura 1.2: Evolución de la Temperatura Crítica

En 1986 Bednorz y Müller [7] hallaron una T_c alrededor de los 30 K en el sistema LaCuO₃ dopado con Ba, trabajo que les hizo merecedores del Premio Nobel en 1987. Muchos investigadores comenzaron a pensar que este material no era posible explicarlo con la teoría BCS. En 1987 Chu y otros [6] encontraron un nuevo material superconductor, el YBa₂Cu₃O₇, con una T_c de 92 K. Luego que la Sociedad Americana de la Física ofreciera un simposio en marzo de 1987 [6], donde se discutieron los avances teóricos y experimentales en el campo, se comenzaron a obtener temperaturas críticas tan altas como 110 K, 125 K y 138 K, para compuestos a base de Bi, Tl y Hg respectivamente.

1.1. Superconductividad Convencional

En física de la Materia Condensada, los principios matemáticos de *simetría* son importantes en caracterizar los distintos estados de la materia y entender las transiciones de fases entre ellos. Los superconductores pueden ser entendidos en términos de sus propiedades fundamentales de simetría, de hecho, la *superconductividad* se interpreta como el estado de simetría espontáneamente rota [8], lo cual quiere decir que la simetría del sistema cambia naturalmente por debajo de una T_c . La superconductividad es uno de los mas importantes ejemplos de este concepto, el de las simetrías, solo después que se entendió en este fenómeno se aplicó a otros sistemas

físicos.

La forma mas simple de entender los cambios de simetría en superconductividad es a través de la teoría de Ginzburg y Landau. Ellos asumieron que la superconductividad puede ser caracterizada por el parámetro de orden $\psi(\mathbf{r})$, un número complejo en cada punto del sólido. También asumieron que la energía Libre de Helmholtz del sólido depende de $\psi(\mathbf{r})$ y se puede escribir como:

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

Aquí F_s es la energía libre de Helmholtz en el estado superconductor y F_n es la energía libre en el estado normal. $A(\mathbf{r})$ es el vector potencial magnético, e es la carga del electrón y a , b y m^* son números a ser determinados experimentalmente para cada material superconductor.

Al sustituir $\psi(\mathbf{r})$ en la ecuación anterior por $\exp(i\theta)\psi(\mathbf{r})$, donde θ es cualquier fase angular, se obtiene exactamente la misma energía libre. Esta transformación es denominada una *transformación global de calibre*, y ya que (1.1) no es alterada por este cambio, se dice que esta transformación es el *grupo de simetría* de F_s . Esta transformación puede visualizarse en el plano complejo representando a ψ como un punto. La operación $\psi \rightarrow \exp(i\theta)\psi$ rota cualquier punto por un ángulo θ alrededor del origen. El grupo de simetría de estas rotaciones es conocido matemáticamente como $U(1)$, llamado grupo de transformaciones unitarias en una dimensión [8].

Por encima de la temperatura crítica el sistema tiene un grupo de simetría la cual incluye las simetrías del cristal, rotaciones de espín de los electrones y la transformación global de calibre. Puede ser representado como un producto G de estos grupos de simetrías individuales:

$$G = G_{cristal} \otimes SU(2) \otimes U(1) \quad (1.2)$$

Donde $G_{cristal}$ es el grupo de simetría del cristal (traslaciones, rotaciones y reflec-

ciones de la red), $SU(2)$ el grupo de las rotaciones de espín y $U(1)$ es el grupo de la simetría global de calibre. En la transición de fase a estado superconductor algunas de estas simetrías son rotas espontáneamente. En aquél superconductor donde se rompa la simetría global de calibre, pero que preserva completamente el grupo de simetría del cristal y el grupo de las rotaciones de espín, es denominado *superconductor convencional*. El grupo de simetría H de este superconductor es un subgrupo de G :

$$H = G_{cristal} \otimes SU(2) \quad (1.3)$$

Estos tipos de superconductores son bien descritos por la teoría BCS, donde un par de electrones experimentan una interacción atractiva mediada por fonones.

1.2. Superconductividad No Convencional

En algunos casos, además del usual cambio en la simetría de calibre, la transición del estado normal al estado superconductor de algunos materiales está acompañado por otros cambios de simetría. Estos cambios implican pérdidas en las simetrías del cristal y en las rotaciones de espín. A estos materiales se les denomina *Superconductores no Convencionales*. El mecanismo de apareamiento en estos materiales es diferente de la interacción electrón-fonón de la teoría BCS. Existe evidencia que la superconductividad no convencional ocurre en al menos dos tipos de materiales [8]: sistemas de Fermiones Pesados y *superconductores de altas temperaturas*.

El par de Cooper es un estado ligado de dos electrones, y así, pueden tener diferentes números cuánticos del momento angular orbital L y spin total S . Este sistema de dos electrones puede tener valores de $L = 0, 1, 2, \dots$, y $S = 0$ ó $S = 1$. Ya que los electrones son fermiones y la función de onda del sistema de dos partículas debe ser antisimétrica bajo intercambio, la función espacial par debe corresponder a una función impar de espín y viceversa. En el *apareamiento singlete* (ver tabla 1.1) los espines de un par de electrones son antiparalelos, con espín total $S = 0$, representado en la notación de Dirac como $|S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$. El singlete puede ocurrir solamente con $L = 0, 2, 4$. El número cuántico L es representado convencionalmente

Tabla 1.1: Simetrías en el estado singlete

Operación	Fermión
Intercambio de Fermión	$\psi(\mathbf{k}) = \psi(-\mathbf{k})$
Rotación Orbital	$g\psi(\mathbf{k}) = \psi(R(g)\mathbf{k})$
Rotación de Espín	$g\psi(\mathbf{k}) = \psi(\mathbf{k})$
Inversión Temporal	$\mathcal{K}\psi(\mathbf{k}) = \psi^*(\mathbf{k})$
Simetría de Calibre $U(1)$	$\Phi\psi(\mathbf{k}) = e^{i\phi}\psi(\mathbf{k})$

según la notación s, p, d, \dots para $L = 0, 1, 2, \dots$ respectivamente.

Los armónicos esféricos dependen del momento angular orbital, el valor L , y de la orientación m_L , el cual puede tener valores $m_L = 0, \dots, \pm L$. En el caso de una función de onda tipo d , $L = 2$, se obtienen cinco funciones angulares, es decir, una por cada valor $m_L = 0, \pm 1, \pm 2$. Estas funciones angulares son etiquetadas convencionalmente como $d_{3(z^2-r^2)}$, d_{xz} , d_{yz} , $d_{x^2-y^2}$ y d_{xy} (ver Fig. 1.3).

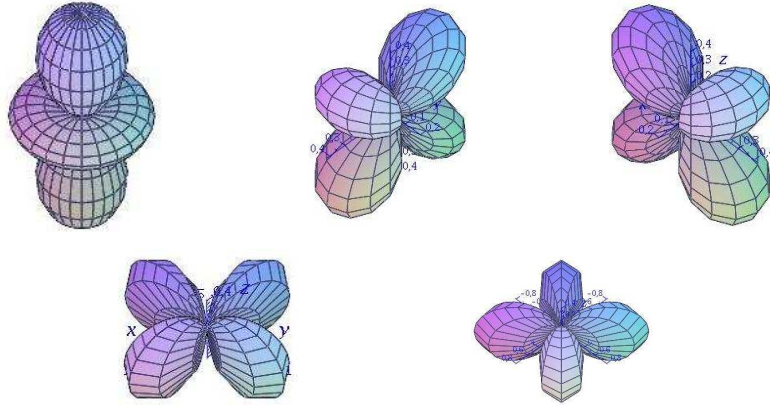


Figura 1.3: Arriba: De izquierda a derecha, los armónicos esféricos $d_{3(z^2-r^2)}$, d_{xz} y d_{yz} . Abajo: d_{yz} y $d_{x^2-y^2}$

Así, igualmente se pueden usar las etiquetas de las funciones de onda angulares para referirse a la simetría del par de Cooper [8] y no a su momento angular. Esto se

debe a que en una red cristalina el par de Cooper tendrá una combinación de estados de distintos momentos angulares. Cualquier otra función con la misma simetría podría ser igualmente usada para describir cada estado; la idea es usar la función mas simple con la correcta simetría.

Existe evidencia experimental de apareamiento s y d para superconductores de altas temeperaturas [9, 10], sobre todo en los cupratos². El apareamiento s -wave también es del tipo singlete, con una muy sencilla simetría esférica, en él se conservan todas las simetrías del cristal. La superconductividad s -wave es del tipo convencional, bien descrito por la teoría BCS [8]. Los superconductores con apareamiento d -wave muestran simetrías $d_{x^2-y^2}$ y d_{xy} (ver Fig.1.4 y Fig. 1.5), por ejemplo, los sistemas YBCO, LSCO, y BSCO³ [10].

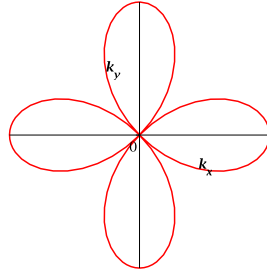


Figura 1.4: Simetría $d_{x^2-y^2}$

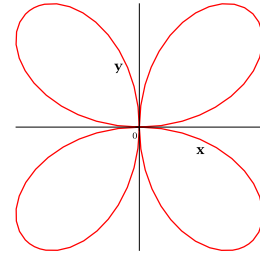


Figura 1.5: Simetría d_{xy}

Estrictamente hablando, la simetría $d_{x^2-y^2}$ en el lenguaje de la superconductividad se refiere al hecho de que al rotar la figura 1.4 por $\pi/2$, esta cambia de signo. Una forma de ilustrar esto es rotando $\pi/2$ los ejes por el origen, el eje x es rotado hasta el eje y y viceversa, entonces, los subíndices de la notación cambian por $y^2 - x^2$, lo cual es el negativo del sistema original, esto es $-(x^2 - y^2)$.

En el próximo capítulo se deriva el espectro de energía para un superconductor partiendo del Hamiltoniano que describe las interacciones en una red cuadrada bidimensional. En la sección 2.2 se deducen las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes,

²Un *cuprato* es un material que contiene aniones de cobre

³YBCO: itrio, bario, cobre, oxígeno; LSCO: lantano, azufre, cobre, oxígeno; BSCO: boro, azufre, cobre oxígeno.

requeridas posteriormente en 3.3 para obtener la ecuación de la brecha de energía en función de la temperatura. En el capítulo 3 se introduce la técnica de Edwards que describe la dispersión por impurezas en los metales. Este formalismo es apropiado para determinar las expresiones que incluyen el efecto de impurezas no magnéticas en superconductores de alta temperatura, que se notará en el capítulo 4, donde los cálculos muestran el comportamiento de algunas propiedades, como la temperatura crítica, la brecha de energía, el tiempo de vida media de los pares de Cooper interactuando con las impurezas y la densidad de estados, para distintas concentraciones de impurezas no magnéticas en el límite unitario y en el límite de Born.

Capítulo 2

Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes para una red cuadrada con simetría $d_{x^2-y^2}$

2.1. Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes para un estado singlete

Evidencia experimental apunta a que ciertos materiales compuestos por capas de Cu-O presentan propiedades superconductoras en dichas capas [9, 11](ver Figura 2.1 derecha). Medidas mediante la técnica de ARPES¹ sugieren que se puede usar la *aproximación de enlace fuerte* para determinar el espectro de energía del superconductor. Por ejemplo, la conductividad eléctrica y el efecto túnel, son dos de estas propiedades que señala que la superconductividad ocurre en los planos Cu-O [12]. Una formulación sencilla de la aproximación de enlace fuerte es aquella provista por el método de segunda cuantización [13]. Un Hamiltoniano apropiado para describir la superconductividad en una red periódica [14] es:

$$\hat{H} = \sum_{m,n,\sigma} t_{m,n} \hat{c}_{m,\sigma}^\dagger \hat{c}_{n,\sigma} - \sum_{m,n} g_{m,n} \hat{n}_{m,\uparrow} \hat{n}_{n,\downarrow} , \quad (2.1)$$

¹ARPES (Angle-resolved photoemission spectroscopy, por su siglas en inglés), es una técnica que permite medir el espectro de energía de los electrones dentro de un sólido.

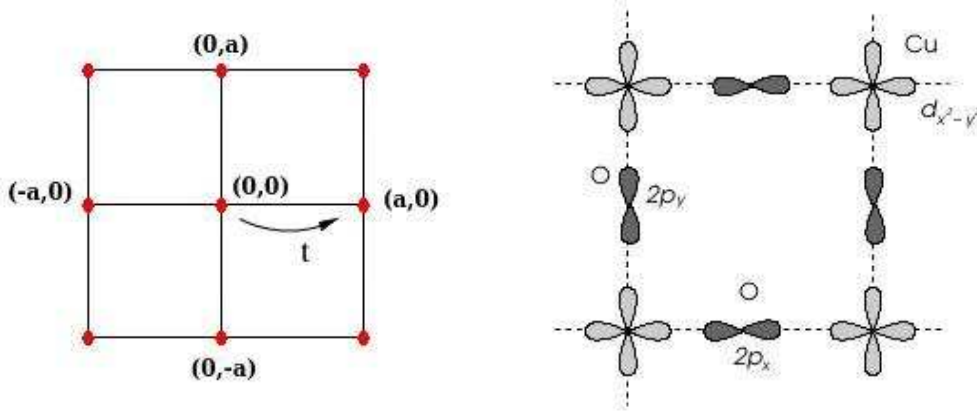


Figura 2.1: *Izquierda:* Modelo simplificado de Red Cuadrada. *Derecha:* Red de un compuesto CuO_2 , común en superconductores de alta temperatura, la cual presenta una combinación de simetrías; p_x y p_y para el O_2 y $d_{x^2-y^2}$ para el Cu. Imagen tomada de [15]

donde el operador $\hat{c}_{m,\sigma}^\dagger$ crea un electrón con espín σ en el sitio m de la red y el operador $\hat{c}_{m,\sigma}$ lo aniquila. Este Hamiltoniano incluye un término con una interacción $g_{m,n}$ entre los estados electrónicos. El valor real $t_{m,n}$ corresponde a la energía de salto entre sitios vecinos en la red. La teoría de campo medio permite simplificar (2.1) a un Hamiltoniano Efectivo [16]

$$\hat{H}_{efec} = \sum_{m,n} \left(t_{m,n} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\uparrow} + t_{m,n} \hat{c}_{m,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} + \Delta_{m,n} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger + \Delta_{n,m}^* \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\uparrow} \right), \quad (2.2)$$

donde $\Delta_{n,m}$ es la brecha de energía ², sobre la cual se habla mas adelante. Los operadores de creación y aniquilación satisfacen las relaciones de anticonmutación

$$\{\hat{c}_{m,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{n,\sigma'}\} = \delta_{m,n} \delta_{\sigma,\sigma'}, \quad (2.3)$$

$$\{\hat{c}_{m,\sigma}^\dagger, \hat{c}_{n,\sigma'}^\dagger\} = 0, \quad (2.4)$$

$$\{\hat{c}_{m,\sigma}, \hat{c}_{n,\sigma'}\} = 0. \quad (2.5)$$

De acuerdo a (2.3) se tiene que $\hat{c}_{m,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} + \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\downarrow}^\dagger = \delta_{m,n}$, y por tanto $\hat{c}_{m,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} =$

²Brecha de Energía, es un intervalo prohibido donde no puede haber estados energéticos, o donde la densidad de estados es cero. Existen Brechas en Superconductores y en Semiconductores, con distinto carácter físico.

$\delta_{m,n} - \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\downarrow}^\dagger$, sustituyendo en la ecuación (2.2), se puede obtener la ecuación

$$\hat{H}_{efec} = \sum_{m,n} \left(t_{m,n} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\uparrow} - t_{m,n} \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\downarrow}^\dagger + \Delta_{m,n} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger + \Delta_{n,m}^* \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\uparrow} \right) + \sum_m t_m \quad . \quad (2.6)$$

La ecuación (2.6) presenta características muy particulares. El término con t_m se refiere a la energía de los electrones en cada sitio m de la red. Los términos con $t_{m,n}$, que contienen un operador de creación $\hat{c}_{m,\sigma}^\dagger$ y un operador de aniquilación $\hat{c}_{n,\sigma}$, son los términos correspondientes a saltos electrónicos entre sitios de la red, que, en este caso, se restringe a la energía de salto entre los sitios vecinos n y m . Los términos que contienen pares de operadores de creación y de destrucción se les llama productos anómalos y pueden crear o destruir pares de electrones.

Invariancia del Hamiltoniano efectivo bajo rotaciones en el espacio de espín

Para un estado singlete el hamiltoniano es invariante bajo rotaciones en el espacio de espines. Esto se debe a que el espín total en un singlete es cero y cualquier rotación produce una configuración de los espines con el mismo valor de espín total. Considérese una rotación de $\alpha = \pi$ radianes alrededor del eje y . Para ello se usa el operador rotación $\mathcal{R}_y(\alpha)$ [17]

$$\mathcal{R}_y(\alpha) = \cos \frac{\alpha}{2} - i \sigma_y \sin \frac{\alpha}{2} \quad , \quad (2.7)$$

donde $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ es la una de las matrices de Pauli. Sustituyendo $\alpha = \pi$ entonces:

$$\mathcal{R}_y(\alpha) = -i \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad . \quad (2.8)$$

Si se hace actuar \mathcal{R}_y sobre los estados de espín se obtiene

$$\mathcal{R}_y \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{lo cual implica } \hat{c}_{m,\uparrow} \text{ se convierte en } \hat{c}_{m,\downarrow} \text{ , y} \quad (2.9)$$

$$\mathcal{R}_y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{donde } \hat{c}_{m,\downarrow} \text{ se convierte en } -\hat{c}_{m,\uparrow} \text{ .} \quad (2.10)$$

Véase el término $\Delta_{m,n} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger$ en (2.6). Por (2.4) $\hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger = -\hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger$, y por (2.9) y (2.10) $\Delta_{m,n} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger = \Delta_{n,m} \hat{c}_{n,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m,\downarrow}^\dagger$, por tanto $\Delta_{m,n} = \Delta_{n,m}$. Si se asume $t_{m,n} = t_{n,m}$, se puede reescribir (2.6) en una forma mas conveniente

$$\hat{H}_{efec} = \sum_{m,n} \left(t_{m,n} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\uparrow} - t_{m,n} \hat{c}_{m,\downarrow} \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger + \Delta_{m,n} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger + \Delta_{n,m}^* \hat{c}_{m,\downarrow} \hat{c}_{n,\uparrow} \right) + \sum_m t_m \text{ .} \quad (2.11)$$

Notación de Nambu

Una notación propuesta por Nambu [18] permite reacomodar la ecuación (2.11) en forma de matrices

$$\hat{H}_{efec} = \sum_{m,n} \begin{pmatrix} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger & \hat{c}_{m,\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{m,n} & \Delta_{m,n} \\ \Delta_{m,n}^* & -t_{m,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{n,\uparrow} \\ \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_m t_m \text{ ,} \quad (2.12)$$

$$= \sum_{m,\alpha;n,\alpha'} \hat{a}_{m,\alpha}^\dagger \hat{T}_{\alpha,\alpha'}^{m,n} \hat{a}_{n,\alpha'} + \sum_m t_m \text{ ,} \quad (2.13)$$

donde $\hat{a}_{m,\alpha}^\dagger$ y $\hat{a}_{n,\alpha'}$ son los operadores de Nambu, que se definen de la siguiente manera

$$\hat{a}_{m,\alpha}^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger & \hat{c}_{m,\downarrow} \end{pmatrix} \text{ ,} \quad (2.14)$$

$$\hat{T}_{\alpha,\alpha'}^{m,n} = \begin{pmatrix} t_{m,n} & \Delta_{m,n} \\ \Delta_{m,n}^* & -t_{m,n} \end{pmatrix} \text{ ,} \quad (2.15)$$

$$\hat{a}_{n,\alpha'} = \begin{pmatrix} \hat{c}_{n,\uparrow} \\ \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \text{ ,} \quad (2.16)$$

Esta notación permite plantear un problema de autovalores

$$\hat{T}^{m,n} \begin{pmatrix} u_s(m1) \\ v_s(m2) \end{pmatrix} = E_s \begin{pmatrix} u_s(m1) \\ v_s(m2) \end{pmatrix} = E_s \begin{pmatrix} u_s(m) \\ v_s(m) \end{pmatrix} , \quad (2.17)$$

que satisfacen las condición de ortonormalidad $\sum_{m,\alpha} u_s^*(m\alpha)u_{s'}(m\alpha) = \delta_{\alpha,\alpha'}$, y la condición de clausura $\sum_s u_s(m\alpha)u_s^*(m'\alpha') = \delta_{m,m'}\delta_{\alpha,\alpha'}$.

Para obtener una solución conjugada, se hace el siguiente cambio de variable para los valores anómalos $\Delta_{m,n}$ y $\Delta_{m,n}^*$. Se definen $\Delta_{m,n}^{(1)}$ y $\Delta_{m,n}^{(2)}$ de la siguiente manera:

$$\Delta_{m,n}^{(1)} = \frac{(\Delta_{m,n} + \Delta_{m,n}^*)}{2} ,$$

y

$$\Delta_{m,n}^{(2)} = \frac{(\Delta_{m,n} - \Delta_{m,n}^*)}{2i} ,$$

así, se puede reescribir $\hat{T}_{\alpha,\alpha'}^{m,n}$ en una notación más apropiada para hacer el análisis de las soluciones conjugadas

$$\hat{T}_{\alpha,\alpha'}^{m,n} = \hat{T}^{m,n} = t_{m,n}\tau_3 + \Delta_{m,n}^1\tau_1 - \Delta_{m,n}^2\tau_2 , \quad (2.18)$$

donde $\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ y $\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ son las matrices de Pauli.

Se define $\hat{Q} = i\tau_2\hat{K}_0$, donde \hat{Q} es el operador de inversión temporal [19] y \hat{K}_0 es el operador complejo conjugado. Se buscan las soluciones conjugadas de la ecuación (2.17), realizando la siguiente transformación

$$\begin{aligned} \hat{Q}^\dagger \hat{T}^{m,n} \hat{Q} &= -i\hat{K}_0^*\tau_2 (t_{m,n}\tau_3 + \Delta_{m,n}^1\tau_1 - \Delta_{m,n}^2\tau_2) i\hat{K}_0\tau_2 , \\ &= \hat{K}_0^* (t_{m,n}\tau_2\tau_3\tau_2 + \Delta_{m,n}^1\tau_2^2\tau_1\tau_2 - \Delta_{m,n}^2\tau_2\tau_1\tau_2) \hat{K}_0 , \end{aligned} \quad (2.19)$$

Es fácil verificar que $\tau_2\tau_3\tau_2 = -\tau_3$, $\tau_2\tau_1\tau_2 = -\tau_1$ y $\tau_2\tau_1\tau_2 = \tau_2$. Sustituyendo esto en la ecuación (2.19) se obtiene que

$$\begin{aligned}\hat{Q}^\dagger \hat{T}^{m,n} \hat{Q} &= \hat{K}_0^* (-t_{m,n} \tau_3 - \Delta_{m,n}^1 \tau_1 - \Delta_{m,n}^2 \tau_2) \hat{K}_0 , \\ &= -\hat{K}_0^* t_{m,n} \tau_3 \hat{K}_0 - \hat{K}_0^* \Delta_{m,n}^1 \tau_1 \hat{K}_0 - \hat{K}_0^* \Delta_{m,n}^2 \tau_2 \hat{K}_0 ,\end{aligned}\quad (2.20)$$

no hay ningún efecto del operador \hat{K}_0 sobre $t_{m,n} \tau_3$ y $\Delta_{m,n}^1 \tau_1$. Haciendo actuar \hat{K}_0 sobre $\Delta_{m,n}^2 \tau_2$

$$\begin{aligned}\hat{K}_0^* \Delta_{m,n}^2 \tau_2 \hat{K}_0 &= \frac{(\Delta_{m,n}^* - \Delta_{m,n})}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \\ &= -\frac{(\Delta_{m,n} - \Delta_{m,n}^*)}{2i} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \\ &= -\Delta_{m,n}^2 \tau_2 ,\end{aligned}\quad (2.21)$$

sustituyendo este resultado en (2.20) se obtiene

$$\begin{aligned}\hat{Q}^\dagger \hat{T}^{m,n} \hat{Q} &= -t_{m,n} \tau_3 - \Delta_{m,n}^1 \tau_1 + \Delta_{m,n}^2 \tau_2 , \\ &= -\hat{T}^{m,n} ,\end{aligned}\quad (2.22)$$

finalmente, el efecto del operador \hat{Q}^\dagger sobre la ecuación (2.17) viene dado por

$$\hat{Q}^\dagger \begin{pmatrix} u_s(m) \\ v_s(m) \end{pmatrix} = \hat{K}_0(-i\tau_2) \begin{pmatrix} u_s(m) \\ v_s(m) \end{pmatrix} = \hat{K}_0 \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_s(m) \\ v_s(m) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -v_s^*(m) \\ u_s^*(m) \end{pmatrix} ,\quad (2.23)$$

donde, si $\begin{pmatrix} u_s(m) \\ v_s(m) \end{pmatrix}$ es una solución con E_s , entonces $\begin{pmatrix} -v_s^*(m) \\ u_s^*(m) \end{pmatrix}$ es una solución conjugada para el autovalor $-E_s$.

Diagonalización del Hamiltoniano

Para diagonalizar el hamiltoniano en (2.13) puede valerse de la propiedad de la delta de Kroneker para contraer índices, así se obtiene que el hamiltoniano efectivo

$$\hat{H}_{efec} = \sum_{m,\alpha;m',\alpha'} a_{m\alpha}^\dagger \hat{T}_{\alpha\alpha'}^{mm'} \delta_{m'm''} \delta_{\alpha'\alpha''} \hat{a}_{m''\alpha''} + \sum_m t_m , \quad (2.24)$$

luego, haciendo uso de las relaciones de ortonormalidad y clausura anteriormente definidas se llega a la siguiente ecuación

$$\hat{H}_{efec} = \sum_{m,\alpha;m',\alpha'} \hat{a}_{m\alpha}^\dagger \hat{T}_{\alpha\alpha'}^{mm'} \sum_s u_s(m'\alpha') u_s^*(m''\alpha'') \hat{a}_{m''\alpha''} + \sum_m t_m , \quad (2.25)$$

usando la ecuación (2.17), la acción de $\hat{T}_{\alpha\alpha'}^{mm'}$ sobre las funciones $u_s(m\alpha)$ produce el autovalor E_s ,

$$\hat{H}_{efec} = \sum_{m,\alpha;m',\alpha'} \sum_s E_s \hat{a}_{m\alpha}^\dagger u_s(m'\alpha') \hat{a}_{m''\alpha''} u_s^*(m''\alpha'') + \sum_m t_m , \quad (2.26)$$

se definen el operador de creación γ_s^\dagger y el operador de aniquilación γ_s de la siguiente manera

$$\gamma_s = \sum_{m''\alpha''} \hat{a}_{m''\alpha''} u_s^*(m''\alpha'') \quad \text{y} \quad \gamma_s^\dagger = \sum_{m\alpha} \hat{a}_{m\alpha}^\dagger u_s(m\alpha) , \quad (2.27)$$

se puede reescribir el hamiltoniano en (2.26) como

$$\hat{H}_{efec} = \sum_s E_s \gamma_s^\dagger \gamma_s + \sum_m t_m . \quad (2.28)$$

Es fácil verificar las relaciones inversas

$$\hat{a}_{m,\alpha} = \sum_s u_s(m\alpha) \gamma_s \quad \text{y} \quad \hat{a}_{m,\alpha}^\dagger = \sum_s u_s(m\alpha)^* \gamma_s^\dagger . \quad (2.29)$$

Del problema de las soluciones conjugadas se determina que por cada solución con $E_s > 0$ existe una solución con $E_s < 0$. Las transformaciones unitarias son entonces

una combinación lineal de (2.17) y (2.23). Fijando $s = k_1$ para la energía positiva y $s = k_2$ para la negativa, se obtiene la siguiente expresión

$$a_{m1} = \hat{c}_{m,\uparrow} = \sum_k \left(u_k(m) \gamma_{k_1} - v_k^*(m) \gamma_{k_2}^\dagger \right) , \quad (2.30)$$

$$a_{m2} = \hat{c}_{m,\downarrow}^\dagger = \sum_k \left(v_k(m) \gamma_{k_1} + u_k^*(m) \gamma_{k_2}^\dagger \right) . \quad (2.31)$$

Las transformaciones (2.30) y (2.31) son las transformaciones unitarias de Bogoliubov. Las funciones de onda $u_k(m)$ y $v_k(m)$ satisfacen

$$|u_k(m)|^2 + |v_k(m)|^2 = 1 . \quad (2.32)$$

2.2. Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes para una red cuadrada con interacción entre primeros vecinos

Se ha visto en el apartado anterior que el hamiltoniano (2.11) se puede diagonalizar, lo cual es expresado en (2.28). Ahora, se muestra como hallar de manera explícita estos valores de la energía, los cuales describen el espectro de energía para una red cuadrada en el estado superconductor. Para ello, se parte desde el problema de autovalores propuesto en (2.17)

$$\sum_n \begin{pmatrix} t_{m,n} & \Delta_{m,n} \\ \Delta_{m,n}^* & -t_{m,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k(n) \\ v_k(n) \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} u_k(m) \\ v_k(m) \end{pmatrix} , \quad (2.33)$$

estas son las ecuaciones de *Bogoliubov-de Gennes* en el espacio real. Se propone una solución con la siguiente forma

$$\begin{pmatrix} u_k(n) \\ v_k(n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i(k_x n_x + k_y n_y)} , \quad (2.34)$$

sustituyendo en la ecuación (2.33)

$$\sum_n \begin{pmatrix} t_{m,n} & \Delta_{m,n} \\ \Delta_{m,n}^* & -t_{m,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i(k_x n_x + k_y n_y)} = E_k \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} . \quad (2.35)$$

La sumatoria es hecha sobre los primeros vecinos para una red cuadrada (vease Fig. 2.1)

$$\left[\begin{pmatrix} t & \Delta_{a_x} \\ \Delta_{a_x} & -t \end{pmatrix} (e^{-ik_x a_x} + e^{ik_x a_x}) + \begin{pmatrix} t & \Delta_{a_y} \\ \Delta_{a_y} & -t \end{pmatrix} (e^{-ik_y a_y} + e^{ik_y a_y}) \right] \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} + \left[\begin{pmatrix} \epsilon_0 & 0 \\ 0 & -\epsilon_0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} . \quad (2.36)$$

Se asume $\Delta_0 = \Delta_{a_x} = \Delta_{a_y}$. De acuerdo a lo estudiado en el capitulo anterior, la simetría $d_{x^2-y^2}$ implica que la magnitud de la brecha cambia de signo cuando sus valores están centrados en el eje y (ver Fig. 1.4), por lo tanto Δ_k se hace negativo en Δ_{a_y} . En una red cuadrada $a_x = a_y = a$. Se puede reescribir la ecuación (2.36) como

$$\begin{pmatrix} \xi_k & \Delta_k \\ \Delta_k & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} , \quad (2.37)$$

con

$$\xi_k = \epsilon_0 + 2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \quad , \quad y \quad (2.38)$$

$$\Delta_k = \Delta_0 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)] \quad , \quad (2.39)$$

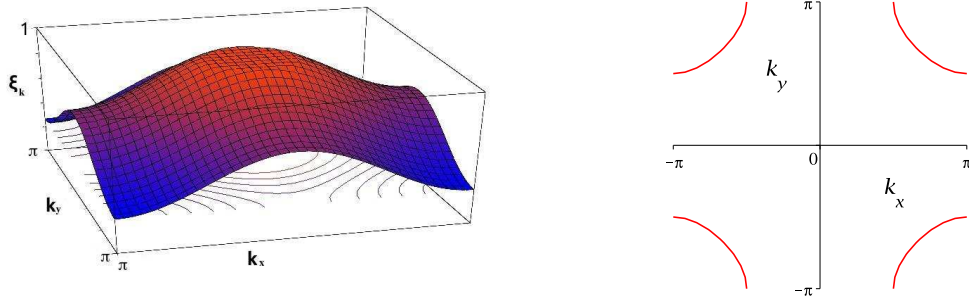


Figura 2.2: Espectro de energía en el estado normal con $t = 0,2 \text{ meV}$ y $\epsilon_0 = 0,4 \text{ meV}$

donde (2.38) es la energía del superconductor en el estado normal (ver Fig. 2.2) y (2.39) es la Brecha Superconductora (ver Fig. 2.3).

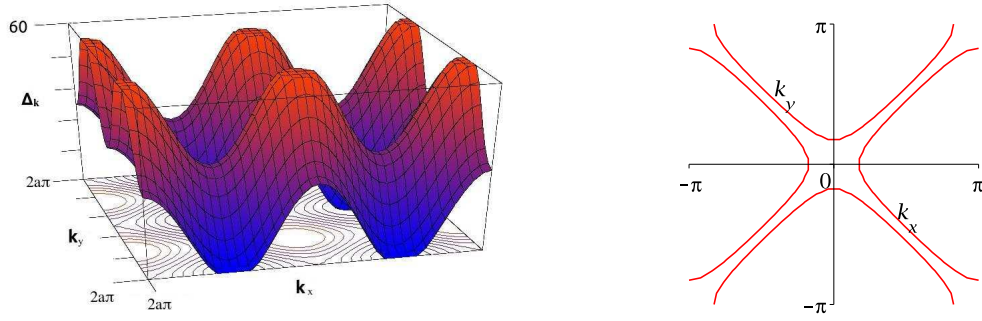


Figura 2.3: Brecha de energía con $\Delta_0 = 24\sqrt{2}meV$ [20].

De (2.37) se puede determinar el espectro de energía superconductor E_k , al resolver el problema de autovalores

$$\begin{vmatrix} \xi_k - E_k & \Delta_k \\ \Delta_k & -(\xi_k + E_k) \end{vmatrix} = -(\xi_k^2 - E_k^2) - \Delta_k^2 = 0 \quad ,$$

$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2} \quad . \quad (2.40)$$

Determinar los autovectores permite hallar de manera explícita las componentes $u_k(m)$ y $v_k(m)$, las cuales son funciones de onda que describen el estado de un electrón y de un hueco respectivamente [21], que cumplen con la condición de normalización (2.32). Por la ecuación (2.37) se obtienen

$$\xi_k u_k + \Delta_k v_k = E_k u_k \quad , \quad (2.41)$$

$$\Delta_k u_k - \xi_k v_k = E_k v_k \quad , \quad (2.42)$$

(2.41) y (2.42) son de gran utilidad para determinar la ecuación de la brecha. Mediante algunos artificios (ver Apéndice C) se pueden desacoplar estas ecuaciones que resultan en las siguientes ecuaciones

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \right)} , \quad (2.43)$$

$$v_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \right)} , \quad (2.44)$$

finalmente

$$v_k u_k = \frac{1}{2} \frac{\Delta_k}{E_k} . \quad (2.45)$$

Esta última expresión será necesaria para determinar la ecuación de la brecha en la sección [3.3](#)

Capítulo 3

Efecto de impurezas no magnéticas en Superconductores de alta temperatura

Superconductores reales son metales que contienen varios tipos de impurezas y defectos de red. La dispersión de cuasipartículas por estos objetos influyen sobre las propiedades superconductoras del metal. Es bien conocido que las impurezas son de dos tipos: magnéticas y no magnéticas. En 1959 P. W Anderson demostró (*teorema de Anderson*) que, incluso un desorden débil con un potencial U_0 , las impurezas no magnéticas no afectan la termodinámica en superconductores convencionales (del tipo BCS). Anderson probó que la temperatura crítica y la brecha de energía son las mismas que para un superconductor sin impurezas [22]. Sin embargo, el teorema de Anderson no es válido en superconductores no convencionales. El objetivo de este capítulo es describir el efecto de impurezas no magnéticas¹, a las que se hará referencia solamente como *impurezas* en adelante, en superconductores no convencionales.

En superconductores convencionales la superconductividad es destruida por la dispersión de impurezas magnéticas, la cual destruye la coherencia del espín electrónico en los pares de Cooper con $S = 0$ [23]. Este mismo efecto puede ocurrir en su-

¹Las *impurezas magnéticas* son aquellas impurezas que contienen momento magnético hospedado en el metal.

perconductores no convencionales por la dispersión de impurezas no magnéticas, la cual destruye la coherencia de la función de onda orbital de los electrones apareados. El decaimiento de la temperatura crítica, en este caso, depende la concentración de impurezas n_{imp} .

En este capítulo se estudiará el efecto de la impurezas en la brecha de energía superconductora, donde se aprecia un decaimiento en la temperatura crítica; luego, se estudia la densidad de estados en un superconductor, para visualizar los estados residuales causados por las impurezas en un superconductor con tipo de onda d ; finalmente, se observa el comportamiento de la densidad residual de estados en función de la temperatura [24].

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

S. F. Edwards en 1961 [25] introdujo la técnica que permitió utilizar los diagramas de Feynman para incluir el hamiltoniano que describe el efecto de las impurezas en un metal normal. Este hamiltoniano viene dado por

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

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

Dicho modelo asume las siguientes condiciones físicas: a $T = 0 \text{ K}$ las impurezas son iguales e independientes entre ellas; las impurezas 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 es

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

U_0 es un potencial aleatorio², donde \mathbf{R}_i representa el punto de dispersión de la impureza y \mathbf{r} la coordenada de la cuasipartícula.

Se define una función de Green³ encamisada, representada por el diagrama de Feynman de la figura 3.1, 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

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

El término con Σ en la ecuación (3.3) 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

$$\Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon) = N \sum_{\mathbf{k}'} U_0(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{k}'}} . \quad (3.5)$$

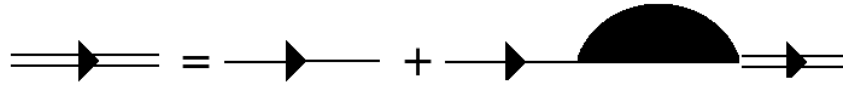


Figura 3.1: Diagrama de Feynman para la función de Green encamisada y promediada por impurezas no magnéticas

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

²Dado que las impurezas se distribuyen aleatoriamente en el metal, un potencial aleatorio es aquel en el que la probabilidad de hallar una impureza en un sitio de la red es uniforme [26].

³Una *función de Green* representa la solución a la ecuación de Schrödinger para una particular condición inicial donde la partícula se encuentra en una posición determinada a un tiempo determinado [26].

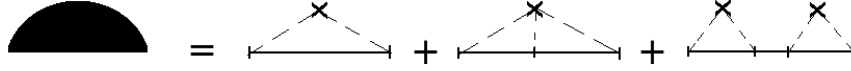


Figura 3.2: Diagrama de Feynman para la auto-energía renormalizada por impurezas no magnéticas

energías por ecuación (3.5), resulta en

$$\langle G(\mathbf{k}, \varepsilon) \rangle = (G^0(\mathbf{k}, \varepsilon)^{-1} - \Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon))^{-1} , \quad (3.6)$$

con la función de Green normal descamisada

$$G^0(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{i\varepsilon - \xi_{\mathbf{k}}} . \quad (3.7)$$

3.2. Formalismo de la matriz \hat{T}

El formalismo empleado para estudiar la energía renormalizada por la presencia de impurezas es la aproximación dada por una matriz \hat{T} ⁴, la cual se conoce como la matriz de dispersión de impurezas no magnéticas. El método asume que la densidad de impurezas n_{imp} es muy pequeña. La interferencia entre diferentes impurezas se desprecia y cada impureza se comporta como un dispersor independiente. Así, se puede considerar el efecto de una sola impureza y luego multiplicarlo por n_{imp} para el caso general. 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 [18], la cual se define como

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

⁴Formalismo de la auto energía renormalizada por la presencia de impurezas no magnéticas para un superconductor no convencional

El símbolo " $\hat{\cdot}$ " sobre la función de Green significa que es una matriz bidimensional del 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. Esta función se convierte en un escalar cuando se encuentra en el estado de un metal normal. La matriz \hat{T} tiene la siguiente forma

$$\hat{T}(\varepsilon) = \hat{U}_0 \cdot \left[\hat{\tau}_0 - \hat{U}_0 \sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_0(\varepsilon, \mathbf{k}) \right]^{-1}, \quad (3.9)$$

con la matriz del potencial de impurezas $\hat{U}_0 = U_0 \hat{\tau}_3$. Se puede aproximar la suma en \mathbf{k} por un promedio de Fermi (ver Apéndice A)

$$\sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_0(\varepsilon, \mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} (G_0^0(\varepsilon, \mathbf{k}) \hat{\tau}_0 + G_0^1(\varepsilon, \mathbf{k}) \hat{\tau}_1 + G_0^3(\varepsilon, \mathbf{k}) \hat{\tau}_3) , \quad (3.10)$$

Estudiando cada componente por separado se tiene que

$$\sum_{\mathbf{k}} G_0^0(\varepsilon, \mathbf{k}) = -i\pi N_F \left\langle \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta_k|^2}} \right\rangle_{S.F} , \quad (3.11)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} G_0^1(\varepsilon, \mathbf{k}) = -i\pi N_F \left\langle \frac{\Delta(\mathbf{k})}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta_k|^2}} \right\rangle_{S.F} , \quad (3.12)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} G_0^3(\varepsilon, \mathbf{k}) = -i\pi N_F \left\langle \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta_k|^2}} \right\rangle_{S.F} , \quad (3.13)$$

donde se ha integrado sobre el espacio \mathbf{k} para la energía del metal y promediando en el modelo de enlace fuerte sobre la superficie de Fermi. La componente $\sum_{\mathbf{k}} G_0^1(\varepsilon, \mathbf{k})$ se hace cero, debido a que el promedio sobre la superficie de Fermi para un superconductor de tipo singlete $\langle \Delta_k \rangle_{S.F} = 0$. Si se asume que es un sistema metálico con simetría electrón-hueco, entonces, $\sum_{\mathbf{k}} G_0^3(\varepsilon, \mathbf{k}) = 0$. Esto permite reescribir la ecuación (3.10) como

$$\sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_0(\varepsilon, \mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} G_0^0(\varepsilon, \mathbf{k}) \hat{\tau}_0 = -i\pi N_F g(\varepsilon) \hat{\tau}_0 , \quad (3.14)$$

donde se ha empleado la definición de una nueva función $g(E_k)$,

$$g(\varepsilon) = \left\langle \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta_k|^2}} \right\rangle_{S.F.} . \quad (3.15)$$

Ahora, con este resultado se puede resolver el cálculo de la matriz inversa de la ecuación (3.9),

$$\begin{aligned} \hat{T}(\varepsilon) &= U_0 \hat{\tau}_3 \cdot [\hat{\tau}_0 + i\pi N_F U_0 \hat{\tau}_3 \cdot (g(\varepsilon) \hat{\tau}_0)]^{-1} , \\ &= U_0 \hat{\tau}_3 \cdot [\hat{\tau}_0 + \pi N_F U_0 g(\varepsilon) \hat{\tau}_3]^{-1} , \end{aligned}$$

con

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

$$\begin{aligned} \hat{T}(\varepsilon) &= U_0 \hat{\tau}_3 \cdot \left[\frac{\hat{\tau}_0 + i\pi N_F U_0 g(\varepsilon) \hat{\tau}_3}{1 - (i\pi N_F U_0 g(\varepsilon))^2} \right] , \\ &= \frac{U_0 \hat{\tau}_3 + i\pi N_F U_0^2 g(\varepsilon) \hat{\tau}_0}{1 - (i\pi N_F U_0 g(\varepsilon))^2} . \end{aligned} \quad (3.16)$$

Más conveniente es introducir el parámetro de cambio de fase c de la onda del par de cooper definido como $c^{-1} = \pi N_F U_0 = \tan \delta_0$, relacionado con el desplazamiento δ_0 de la fase de la función de onda. Si se supone simetría electrón-hueco se obtiene que la componente $T^3(\varepsilon) = 0$, finalmente resulta

$$\hat{T}(\varepsilon) = \frac{i(\pi N_F)^{-1} g(\varepsilon)}{c^2 + g(\varepsilon)^2} \hat{\tau}_0 . \quad (3.17)$$

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 $\Gamma^+ = n_{imp}/(\pi N_F)$ [20, 23]. La auto-energía renormalizada debido a la presencia de impurezas no magnéticas viene dada por

$$t(\varepsilon) = \varepsilon + \Sigma(t(\varepsilon)) . \quad (3.18)$$

La energía $\varepsilon = \hbar\omega$. Fijando $\hbar = 1$ en favor de la simplicidad, entonces la ecuación (3.18) se puede reescribir como la siguiente expresión

$$\tilde{\omega} = \omega + i\pi\Gamma^+ \frac{g(\tilde{\omega})}{c^2 + g(\tilde{\omega})^2} , \quad (3.19)$$

la parte real de la ecuación representa la energía, la parte imaginaria define el llamado tiempo de vida promedio, τ_s ⁵, de los pares de Cooper [23]

$$\text{Im}(\tilde{\omega}) = \frac{1}{2\tau_s(\tilde{\omega})} . \quad (3.20)$$

Por último se nota que (3.19) es una ecuación compleja y además autoconsistente, 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 que serán presentados y estudiados posteriormente.

3.2.1. Límites de la matriz de dispersión

Límite de Born y Límite Unitario

Siguiendo [13] se tiene que el campo de impurezas puede considerarse como una perturbación, lo cual significa que la fase de la función de onda del par de Cooper $\delta_0 \rightarrow 0$, entonces la matriz de dispersión resulta en el llamado *límite de Born*. Para este caso el potencial de impurezas

$$U_0 \ll \frac{\hbar^2}{m^*a^2} , \quad (3.21)$$

donde a es el radio de acción del potencial de la impureza y m^* es la masa efectiva. Si se considera un potencial U_0 de gran magnitud, a saber, para $U_0 \gg \hbar^2/m^*a^2$, no se puede desarrollar la teoría de perturbaciones (por ejemplo el caso de los fermiones pesados, UPT y UBe), sin embargo, en este caso se presenta una resonancia muy acentuada que conduce a una fase constante ($\delta_0 \rightarrow \pi/2$) [13]. Cuando se tienen estas condiciones el nivel de energía se denomina cuasidiscreto, y su momento angular es $l \neq 0$, para cuasipartículas que interaccionan con dicho potencial, por ejemplo, el caso de un superconductor de alta temperatura que presenta estado singlete donde $l = 2$ [20]. Este límite es usualmente llamado en teoría de dispersión

⁵No confundir τ_s , el tiempo de vida medio, con τ_i con $i = 0, 1, 2, 3$, estos últimos representan las matrices de Pauli.

el *límite unitario*, o límite resonante, y se caracteriza porque su estado cuasivirtual posee un tiempo de vida mucho mayor que el tiempo de vida en el límite de Born [20].

Es más conveniente seguir la ecuación (3.19) usando la definición de la fase, $U_0\pi N_F = \tan \delta_0$, que resulta en

$$\tilde{\omega} = \omega + \frac{1}{2\tau_n} \frac{ig(\tilde{\omega})}{\cos^2 \delta_0 + \sin^2 \delta_0 g(\tilde{\omega})} , \quad (3.22)$$

donde

$$\frac{1}{2\tau_n} = \frac{n_{imp}}{\pi N_0} \sin^2 \delta_0 .$$

Para el caso unitario se define una constante $\Gamma_U^+ = n_{imp}/(\pi^2 N_F)$. Entonces, la ecuación (3.19) toma la forma

$$\tilde{\omega} = \omega + \frac{i\pi\Gamma_U^+}{g(\tilde{\omega})} , \quad (3.23)$$

igualmente para el límite de Born, se define $\Gamma_B^+ = \Gamma_u^+ / \cot^2 \delta_0$. En este caso, la ecuación (3.19) resulta en

$$\tilde{\omega} = \omega + i\pi\Gamma_B^+ g(\tilde{\omega}) . \quad (3.24)$$

Un parámetro importante es la frecuencia resonante γ que se define como $i\gamma = \tilde{\omega}(\omega = 0)$. Haciendo cero la frecuencia en la ecuación (3.19) se consigue la expresión

$$\gamma = \pi\Gamma^+ \frac{g(i\gamma)}{c^2 + g(i\gamma)^2} , \quad (3.25)$$

$$g(i\gamma) = \left\langle \frac{\gamma}{\sqrt{\gamma^2 + \Delta(\mathbf{k})^2}} \right\rangle_{S.F} . \quad (3.26)$$

3.3. Ecuación de la Brecha Superconductora

El cambio de estado normal a estado superconductor supone una *brecha de energía* Δ_k , que es la energía mínima necesaria para llevar al superconductor de su estado base al primer estado excitado [27]. El descubrimiento de los superconductores

de alta temperatura por Bednorz and Müller produjo inmediatamente interrogantes sobre el comportamiento de Δ_k en estos materiales [28]. Evidencia experimental muestra que la brecha en superconductores de alta temperatura es altamente anisotrópica. Uno de estos casos es la brecha con simetría $d_{x^2-y^2}$ (ver Fig. 1.4), cuya magnitud varía como en la ecuación (2.39).

Se ha dicho que la superconductividad ocurre por debajo de una temperatura crítica T_c , única para cada material. Es menester entonces hallar una expresión que describa este comportamiento. Esto puede hacerse empleando un *método variacional* propuesto por R. Feynman [29]. Partiendo de la ecuación de la energía libre de Helmholtz,

$$F = \langle \hat{H} \rangle - TS = \langle \hat{H}_{efec} \rangle - TS + \langle \hat{H} \rangle - \langle \hat{H}_{efec} \rangle , \quad (3.27)$$

donde \hat{H} es el hamiltoniano de la ecuación (2.1), T es la temperatura, S la entropía y \hat{H}_{efec} es el hamiltoniano efectivo de la ecuación (2.11). Se puede reescribir la ecuación (3.27) como

$$F = F_0 + \langle \hat{H} - \hat{H}_{efec} \rangle , \quad (3.28)$$

con $F_0 = \langle \hat{H}_{efec} \rangle - TS$. Determinemos la variación $\delta F = \delta F_0 + \delta \langle \hat{H} - \hat{H}_{efec} \rangle$

$$\begin{aligned} \delta F_0 &= \langle \delta \hat{H}_{efec} \rangle - T \delta S = \sum_{m,n} \left\langle \delta \left(t_{m,n} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\uparrow} - t_{m,n} \hat{c}_{m,\downarrow} \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \right) \right\rangle + \sum_{m,n} \left\langle \delta \left(\Delta_{m,n} \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \Delta_{n,m}^* \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\uparrow} + t_m \right) \right\rangle - T \delta S , \\ &= \sum_{m,n} \left(\delta t_{m,n} \langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\uparrow} \rangle - \delta t_{m,n} \langle \hat{c}_{m,\downarrow} \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \rangle + \delta \Delta_{m,n} \langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} \rangle + \delta \Delta_{n,m}^* \langle \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle \right) \\ &\quad - T \delta S , \quad (3.29) \end{aligned}$$

se asume $\langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\uparrow} \rangle = 0$, puesto que hace referencia a una interacción entre distinto sitios de red, m y n , en este caso se toma en cuenta solo aquellas interacciones en el

mismo sitio de la red. Esto reduce la variación (3.29) a

$$\delta F_0 = \sum_{m,n} \left(\delta \Delta_{m,n} \langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \rangle + \delta \Delta_{n,m}^* \langle \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle \right) - T \delta S , \quad (3.30)$$

siguiendo un razonamiento similar se puede calcular $\delta \langle \hat{H} - \hat{H}_{efec} \rangle$.

$$\langle \hat{H} - \hat{H}_{efec} \rangle = \sum_{m,n} \left(-g_{m,n} \langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m,\uparrow} \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} \rangle - \Delta_{m,n} \langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \rangle - \Delta_{n,m}^* \langle \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle \right) . \quad (3.31)$$

Por las relaciones (2.3), (2.4) y (2.5) $\langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m,\uparrow} \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} \rangle = \langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle$. Variándose del Teorema de Wick [16] se puede hacer una expansión en términos de los valores medios

$$\begin{aligned} \sum_{m,n} g_{m,n} \langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle &= \sum_{m,n} g_{m,n} \left(\langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle + \langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle \langle \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} \rangle \langle \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle \right) . \end{aligned} \quad (3.32)$$

se asume $\langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle = \langle \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} \rangle = 0$ debido a que el apareamiento de Cooper ocurre para partículas con espines opuestos. Igualmente $\langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow} \rangle = \langle \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle = 0$, debido a la ausencia de interacción magnética. Renombrando $\Psi_{m,n} = \langle \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle$ y $\Psi_{m,n}^* = \langle \hat{c}_{m,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n,\downarrow}^\dagger \rangle$, la ecuación (3.31) se puede reescribir como

$$\langle \hat{H} - \hat{H}_{efec} \rangle = \sum_{m,n} \left(-g_{m,n} \Psi_{m,n}^* \Psi_{m,n} - \Delta_{m,n} \Psi_{m,n}^* - \Delta_{m,n}^* \Psi_{m,n} \right) , \quad (3.33)$$

calculando la variación de (3.33)

$$\begin{aligned} \delta \langle H - \mathcal{H}_{efec} \rangle &= \sum_{m,n} \left(-g_{m,n} (\Psi_{m,n}^* \delta \Psi_{m,n} + \Psi_{m,n} \delta \Psi_{m,n}^*) - \delta \Delta_{m,n} \Psi_{m,n}^* - \Delta_{m,n} \delta \Psi_{m,n}^* \right. \\ &\quad \left. - \delta \Delta_{m,n}^* \Psi_{m,n} - \Delta_{m,n}^* \delta \Psi_{m,n} \right) , \end{aligned} \quad (3.34)$$

se puede escribir δF en una forma mas conveniente,

$$\delta F = \sum_{m,n} \left(-g_{m,n} (\Psi_{m,n}^* \delta \Psi_{m,n} + \Psi_{m,n} \delta \Psi_{m,n}^*) - \Delta_{m,n} \delta \Psi_{m,n}^* - \Delta_{m,n}^* \delta \Psi_{m,n} \right) - T \delta S \quad , \quad (3.35)$$

luego, se determina $\delta F / \delta \Psi_{m,n}^* = 0$, cuyo cálculo es sencillo. El resultado de esta minimización es

$$\begin{aligned} -g_{m,n} \Psi_{m,n} - \Delta_{m,n} &= 0 \\ \Delta_{m,n} &= -g_{m,n} \Psi_{m,n} = -g_{m,n} \langle \hat{c}_{n,\downarrow} \hat{c}_{m,\uparrow} \rangle \quad , \end{aligned} \quad (3.36)$$

ahora, se sustituyen las transformaciones unitarias (2.30) y (2.31) en (3.36)

$$\begin{aligned} \Delta_{m,n} &= -g_{m,n} \left\langle \sum_k \left(u_k(n) \gamma_k + v_k^*(n) \gamma_k^\dagger \right) \sum_{k'} \left(u_{k'}(m) \gamma_{k'} - v_{k'}^*(m) \gamma_{k'}^\dagger \right) \right\rangle \quad , \\ &= -g_{m,n} \sum_{k,k'} \left(\langle \gamma_k \gamma_{k'} \rangle u_k(n) u_{k'}(m) - \langle \gamma_k \gamma_{k'}^\dagger \rangle u_k(n) v_{k'}^*(m) + \langle \gamma_k^\dagger \gamma_{k'} \rangle v_k^*(n) u_{k'}(m) \right. \\ &\quad \left. - \langle \gamma_k^\dagger \gamma_{k'}^\dagger \rangle v_k^*(n) v_{k'}^*(m) \right) \quad . \end{aligned} \quad (3.37)$$

Se tiene que $\langle \gamma_k \gamma_{k'} \rangle = \langle \gamma_k^\dagger \gamma_{k'}^\dagger \rangle = 0$. Ya se ha dicho que los operadores γ_k y γ_k^\dagger cumplen las reglas de anticonmutación $\gamma_k \gamma_{k'}^\dagger + \gamma_{k'}^\dagger \gamma_k = \delta_{k,k'}$. La cantidad $\langle \gamma_{k'}^\dagger \gamma_k \rangle = \langle n \rangle = \delta_{k,k'} f(E_k)$, donde $f(E_k) = 1/(1 + e^{E_k/k_b T})$ no es mas que la distribución de Fermi. Teniendo en cuenta estas transformaciones (3.37) se reduce a

$$\begin{aligned} \Delta_{m,n} &= -g_{m,n} \sum_{k,k'} \left(\delta_{k,k'} f(E_k) v_k^*(n) u_{k'}(m) - (\delta_{k,k'} - \delta_{k,k'} f(E_k)) v_{k'}^*(m) u_k(n) \right) \\ \Delta_{m,n} &= -g_{m,n} \sum_k \left(f(E_k) v_k^*(n) u_k(m) + f(E_k) v_k^*(m) u_k(n) - v_k^*(m) u_k(n) \right) \end{aligned} \quad (3.38)$$

igual que en la ecuación (2.34), se hace

$$u_k(m) = u_k \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{m}} \quad y \quad v_k(n) = v_k \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} , \quad (3.39)$$

con u_k y v_k reales,

$$\Delta_{m,n} = -\frac{g_{m,n}}{N} \sum_k \left(f(E_k) v_k u_k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{m}-\mathbf{n})} + f(E_k) v_k u_k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{n}-\mathbf{m})} - v_k u_k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{n}-\mathbf{m})} \right) . \quad (3.40)$$

Se ha visto que $\Delta_{m,n}$ es la energía que cada partícula del par de Cooper requiere para desligarse y hacerse una partícula independiente. Ahora, se busca determinar la ecuación de la brecha de un sistema como el de la red cuadrada en la figura (2.1), teniendo en cuenta solo los primeros vecinos. Esto requiere calcular $\Delta_{m,n}$ en los sitios con $n = m + a_x$ y $n = m - a_x$ para los vecinos en el eje horizontal, luego $n = m + a_y$ y $n = m - a_y$ en el eje vertical. Se asume que la interacción $g_{m,n}$ es una interacción atractiva constante, tal que $g_{m,n} = g$. El signo negativo en (3.40) implica que g es una interacción atractiva. Tomando en cuenta estas consideraciones se puede calcular $\Delta_{m,n}$ para cada sitio de la red

$$\Delta_{m,m+a_x} = -\frac{g}{N} \sum_k v_k u_k \left[f(E_k) (e^{-ik_x a_x} + e^{ik_x a_x}) - e^{ik_x a_x} \right] , \quad (3.41)$$

$$\Delta_{m,m-a_x} = -\frac{g}{N} \sum_k v_k u_k \left[f(E_k) (e^{ik_x a_x} + e^{-ik_x a_x}) - e^{-ik_x a_x} \right] . \quad (3.42)$$

se hace $\Delta_{a_x} = \Delta_{m,m+a_x} + \Delta_{m,m-a_x}$, por (30) $v_k u_k = \Delta_k / (2E_k)$

$$\Delta_{a_x} = \frac{g}{N} \sum_k \frac{\Delta_k}{E_k} \left[\cos(k_x a_x) - 2f(E_k) \cos(k_x a_x) \right] = \frac{g}{N} \sum_k \frac{\Delta_k}{E_k} \cos(k_x a_x) \left[1 - 2f(E_k) \right] , \quad (3.43)$$

y $\Delta_{a_y} = \Delta_{m,m+a_y} + \Delta_{m,m-a_y}$. Por (2.39), en el eje k_y la brecha se hace negativa, como muestra la figura 2.3, entonces

$$\Delta_{a_y} = -\frac{g}{N} \sum_k \frac{\Delta_k}{E_k} \left[\cos(k_y a_y) - 2f(E_k) \cos(k_y a_y) \right] = -\frac{g}{N} \sum_k \frac{\Delta_k}{E_k} \cos(k_y a_y) \left[1 - 2f(E_k) \right] , \quad (3.44)$$

La energía total del sistema es $\Delta_{a_x} + \Delta_{a_y}$. Por conveniencia, se toma en cuenta $k > 0$, en este caso la energía $\Delta_0 = (\Delta_{a_x} + \Delta_{a_y})/2$,

$$\Delta_0 = \frac{g}{2N} \sum_k \frac{\Delta_k}{E_k} \left[\cos(k_x a_x) - \cos(k_y a_y) \right] \left[1 - 2f(E_k) \right] , \quad (3.45)$$

en una red cuadrada $a_x = a_y = a$, además, $\Delta_k = \Delta_0 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]$,

$$\Delta_0 = \frac{g}{2N} \sum_k \frac{\Delta_0}{E_k} \left[\cos(k_x a) - \cos(k_y a) \right]^2 \left[1 - 2f(E_k) \right] , \quad (3.46)$$

se puede demostrar que el factor $1 - 2f(E_k) = \tanh(\beta E_k/2)$, con $f(E_k) = 1/(e^{\beta E_k} + 1)$. Definiendo $\phi_k^2 = [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2$, permite reescribir (3.46) como

$$1 = \frac{g}{2N} \sum_k \frac{\phi_k^2}{E_k} \tanh\left(\frac{\beta E_k}{2}\right) , \quad (3.47)$$

la ecuación autoconsistente (3.47) es la *ecuación de la brecha superconductora*, con $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}$, $\beta = 1/(k_B T)$, y por simplificación se toma $k_B = 1$, se obtiene la siguiente ecuación

$$1 = \frac{g}{TN} \sum_k \frac{\phi_k^2}{2E_k/T} \tanh\left(\frac{E_k}{2T}\right) . \quad (3.48)$$

La ecuación (3.48) se puede reescribir de una manera mas conveniente, lo cual permite el uso de herramientas numéricas para hacer cálculos de estas propiedades. En este sentido, se puede hacer uso de los promedios de la superficie de Fermi (ver apéndice A), que resulta en la siguiente expresión

$$\frac{1}{gN_F} = \frac{T\pi}{\langle \phi_k^2 \rangle} \sum_n \left\langle \frac{\phi_k^2}{\sqrt{|\tilde{\omega}_n|^2 + \Delta_k^2}} \right\rangle_{SF} , \quad (3.49)$$

donde $\tilde{\omega}_n = \omega_n + \alpha$ es la frecuencia de Matsubara, con $\omega_n = (2n+1)T\pi$, α representa el efecto de la impurezas en el superconductor, y N_F es la densidad de estados en el nivel de Fermi. Si se hace $\Delta_k = 0$ y $\alpha = 0$ en la ecuación (3.49) resulta en

$$\frac{1}{gN_F} = \pi T \sum_n \frac{1}{|\omega_n|} = \sum_{n \geq 0} \frac{1}{n + 1/2} , \quad (3.50)$$

esta última expresión es una serie que diverge. Para sortear esto, se acota hasta un valor $n_c = \omega_c/(2\pi T_{c0})$, donde T_{c0} es la temperatura crítica para un superconductor sin impurezas ($\Gamma^+ = 0$). Así, la serie en la ecuación (3.50) converge a una expresión bien conocida, de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \sum_{n \geq 0}^{n_c} \frac{1}{n + 1/2} &= \ln(4\gamma n_c) = \ln\left(\frac{\omega_c}{2\pi T_c} \frac{T_{c0}}{T_{c0}}\right) + \ln(4\gamma) , \\ &= \ln\left(4\gamma \frac{\omega_c}{2\pi T_{c0}}\right) + \ln\left(\frac{T_{c0}}{T_c}\right) . \end{aligned} \quad (3.51)$$

El primer término del lado derecho de la igualdad en la ecuación (3.51) es nuevamente la de la ecuación (3.50)

$$\sum_{n \geq 0} \frac{1}{n + 1/2} = \frac{1}{gN_F} + \ln\left(\frac{T_{c0}}{T_c}\right) , \quad (3.52)$$

por la ecuación (3.49) y haciendo un poco de álgebra

$$\ln\left(\frac{T_{c0}}{T_c}\right) = 2\pi T \sum_n \left[\frac{1}{(2n+1)\pi T} - \frac{1}{\langle \phi_k^2 \rangle} \sum_n \left\langle \frac{\phi_k^2}{\sqrt{|\tilde{\omega}_n|^2 + \Delta_k^2}} \right\rangle_{SF} \right] . \quad (3.53)$$

Con el fin de escribir en términos adimensionales se introduce la siguiente notación: $T \rightarrow T \cdot T_{c0}$, $\Delta_0 \rightarrow \Delta_0 \cdot T_{c0}$ y $\tilde{\omega}_n \rightarrow \tilde{\omega}_n \cdot T_{c0}$. A T se le llama la temperatura reducida.

$$\ln\left(\frac{1}{T}\right) = 2\pi T \sum_n \left[\frac{1}{(2n+1)\pi T} - \frac{1}{\langle \phi_k^2 \rangle} \left\langle \frac{\phi_k^2}{\sqrt{|\tilde{\omega}_n|^2 + \Delta_k^2}} \right\rangle_{SF} \right] . \quad (3.54)$$

En general, se puede hacer uso de la ecuación (3.54) para obtener cálculos que incluyan el efecto de las impurezas, es decir, para α distinto de cero. La brecha de energía, Δ_k , se hace cero cuando se llega a la temperatura crítica T_c , por lo tanto, la ecuación (3.54) se reduce a

$$\begin{aligned} \ln\left(\frac{1}{T}\right) &= 2\pi T \sum_n \left[\frac{1}{(2n+1)\pi T} - \frac{1}{(2n+1)\pi T + \alpha} \right] , \\ &= \frac{\alpha}{2\pi T} \sum_n \frac{1}{(n+1/2)(n+1/2 + \alpha/2\pi T)} , \end{aligned} \quad (3.55)$$

la última ecuación se encuentra de hecho normalizada, lo cual hace el argumento del logaritmo neperiano igual a uno y por lo tanto la ecuación (3.55) se hace cero, al combinarse con la ecuación (3.54), entonces

$$\begin{aligned} \frac{\alpha}{2\pi T} \sum_n \frac{1}{(n+1/2)(n+1/2 + \alpha/2\pi T)} + \ln\left(\frac{1}{T}\right) - \\ 2\pi T \sum_n \left[\frac{1}{(2n+1)\pi T} - \frac{1}{\langle \phi_k^2 \rangle} \sum_n \left\langle \frac{\phi_k^2}{\sqrt{|\tilde{\omega}_n|^2 + \Delta_k^2}} \right\rangle_{SF} \right] = 0 . \end{aligned} \quad (3.56)$$

3.4. Densidad de Estados en un superconductor de alta temperaturas

La *Densidad de Estados* es definida como el número de estados ocupados por rango de energía. En superconductores convencionales la densidad de estados tiende a valores muy grandes para energías cercanas al valor de la brecha, por debajo de la cual la densidad de estados es cero. En superconductores no convencionales la anisotropía de la brecha, reflejado en su dependencia en el vector de onda \mathbf{k} , hace que

la densidad de estados alcance un umbral (singularidades de *Van Hove*) a energías cercanas a la amplitud de la brecha y luego desciende, de manera tal que cuando la frecuencia es cero la densidad de estados tiende a cero o a un valor, llamado densidad residual de estados, como se ve mas adelante. Partiendo de la definición

$$N(E) = \frac{2}{V} \sum_k \delta(E_{\mathbf{k}} - E) , \quad (3.57)$$

donde V es el volumen en el espacio real y $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}$ es el espectro de energía obtenido en (2.40). Nuevamente, se puede aproximar la sumatoria en \mathbf{k} por la integral (3)

$$N(E) = N_F \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|} \int d\xi \delta \left(\sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2} - E \right) . \quad (3.58)$$

Se puede redefinir el argumento de la delta como $g(\xi_k) = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2} - E$, de tal manera que $\delta \left(\sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2} - E \right) = \delta[g(\xi_k)]$, para la que existe la relación

$$\delta[g(\xi)] = \sum_i \frac{1}{|g'(\xi_i)|} \delta(\xi - \xi_i) ,$$

donde ξ_i son las raíces para $g(\xi) = 0$. La única raíz en este caso es $\xi_k = \sqrt{E^2 - |\Delta_k|^2}$. También, se tiene que

$$g(\xi)' = \frac{\partial g(\xi)}{\partial \xi} = \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta_k|^2}} = \frac{\sqrt{E^2 - |\Delta_k|^2}}{E} , \quad (3.59)$$

introduciendo estos cambios en (3.58)

$$\begin{aligned} \frac{N(E)}{N_F} &= \frac{1}{N_F(2\pi)^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|} \int d\xi \frac{E}{\sqrt{E^2 - |\Delta_k|^2}} \delta \left(\xi - \sqrt{E^2 - |\Delta_k|^2} \right) , \\ &= \frac{1}{N_F(2\pi)^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|} \frac{E}{\sqrt{E^2 - |\Delta_k|^2}} = \left\langle \frac{E}{\sqrt{E^2 - |\Delta_k|^2}} \right\rangle_{SF} , \end{aligned} \quad (3.60)$$

donde (3.60) es la densidad de estados promediada en la superficie de Fermi. Se puede escribir la energía en términos de $\tilde{\omega}$, la frecuencia renormalizada. La energía

depende de la frecuencia como $E = \omega \hbar$, con $\hbar = 1$ por simplificación

$$\frac{N(\tilde{\omega})}{N_F} = \text{Re} \left\langle \frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\tilde{\omega}^2 - |\Delta_k|^2}} \right\rangle_{SF}, \quad (3.61)$$

con $\tilde{\omega} = \omega + i\alpha$, donde se ha llamado α a la parte imaginaria de la ecuación (3.19).

Para obtener explícitamente la parte real de (3.61) es conveniente escribir

$$a_k = \omega^2 - \alpha^2 - |\Delta_k|^2, \quad (3.62)$$

$$b_k = 2\omega\alpha, \quad (3.63)$$

$$\rho_k = \sqrt{a_k^2 + b_k^2}, \quad (3.64)$$

luego de realizar el algebra (ver apéndice B), (3.61) puede reescribirse finalmente como

$$\frac{N(\tilde{\omega})}{N_F} = \left\langle \frac{\omega}{\sqrt{2\rho_k}} \sqrt{1 + \frac{a_k}{\rho_k}} \right\rangle_{SF} + \left\langle \frac{\alpha}{\sqrt{2\rho_k}} \sqrt{1 - \frac{a_k}{\rho_k}} \right\rangle_{SF}. \quad (3.65)$$

Densidad Residual de Estados

Los pares de Cooper resultan ligados a las impurezas y el efecto que produce es descrito por la parte imaginaria de la frecuencia renormalizada, y es reflejado en las propiedades de los superconductores no convencionales. Una de estas propiedades es la densidad de estados, como se vio en el apartado anterior. Cuando la frecuencia, ω , se hace cero, existen un número de estados ocupados por los pares de Cooper, a esa cantidad se le denomina *densidad residual de estados*, a la cual se denota por $N(0)/N_F$. Es natural, entonces, buscar una expresión analítica para la densidad residual. Así, partiendo de (3.61), esto se puede conseguir haciendo $\omega = 0$ en la frecuencia renormalizada

$$\frac{N(0)}{N_F} = \left\langle \frac{i\alpha}{\sqrt{(i\alpha)^2 - |\Delta_k|^2}} \right\rangle_{SF} = \left\langle \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + |\Delta_k|^2}} \right\rangle_{SF}, \quad (3.66)$$

Para estudiar como es la influencia de la concentración de impurezas en la den-

sidad residual se restringe el problema al análisis en el *límite unitario* y el *límite de Born*. En el límite de Born se obtiene la ecuación (3.24), fijando $\omega = 0$

$$\tilde{\omega} = i\alpha = i\pi\Gamma_B^+ \left\langle \frac{i\alpha}{\sqrt{(i\alpha)^2 - |\Delta_k|^2}} \right\rangle_{SF}, \quad (3.67)$$

dividiendo en ambos lados por i y Δ_0

$$\begin{aligned} \alpha &= \pi\Gamma_B^+ \left\langle \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + |\Delta_k|^2}} \right\rangle_{SF}, \\ \frac{\alpha}{\Delta_0} &= \frac{\pi\Gamma_B^+}{\Delta_0} \left\langle \frac{\alpha}{\Delta_0 \sqrt{(\alpha/\Delta_0)^2 + |\phi_k|^2}} \right\rangle_{SF}, \end{aligned} \quad (3.68)$$

renombrano $\zeta = \Gamma_B^+/\Delta_0$ y $C_0 = \alpha/\Delta_0$ se puede reescribir (3.69)

$$C_0 = \pi\zeta \left\langle \frac{C_0}{\sqrt{C_0^2 + |\phi_k|^2}} \right\rangle_{SF}, \quad (3.69)$$

finalmente la densidad residual en el límite de Born es

$$\frac{N(0)}{N_F} = \frac{C_0}{\pi\zeta}. \quad (3.70)$$

En el límite unitario, la densidad residual está dada por la ecuación (3.23). Haciendo $\omega = 0$

$$i\alpha = i\pi\Gamma_U^+ \left\langle \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + |\Delta_k|^2}} \right\rangle_{SF}^{-1}, \quad (3.71)$$

nuevamente, con $\zeta = \Gamma_U^+/\Delta_0$ y $C_0 = \alpha/\Delta_0$

$$C_0 = \pi\zeta \left\langle \frac{C_0}{\sqrt{C_0^2 + |\phi_k|^2}} \right\rangle_{SF}^{-1}, \quad (3.72)$$

la densidad residual en el límite unitario resulta en la expresión

$$\frac{N(0)}{N_F} = \frac{\pi\zeta}{C_0}. \quad (3.73)$$

Como se ha dicho antes, en superconductores no convencionales la temperatura

crítica cambia con la concentración de impurezas. Es pertinente, entonces, estudiar como cambia la densidad residual de estados con la temperatura, haciendo uso de la definición $\zeta = \Gamma^+/\Delta_0$, donde la cantidad Γ^+ está relacionada con la concentración de impurezas.

Haciendo $\Delta_k = 0$ en (6), y mediante el uso de algunas relaciones matemáticas, se llega a la formula de Abrikosov-Gor'kov [23]

$$-\ln\left(\frac{T_c}{T_{c0}}\right) = \psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\Gamma^+}{2\pi T_c}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) = \psi'\left(\frac{1}{2}\right) \frac{\Gamma^+}{2\pi T_c} , \quad (3.74)$$

con T_{c0} la temperatura crítica para $n_{imp} = 0$. La función $\psi(x)$, es la función digama, con $\psi'\left(\frac{1}{2}\right) = \pi^2/2$, su primera derivada evaluada en $1/2$. Es posible demostrar que $\Delta_{00}/T_{c0} = 1,764$, con Δ_{00} la brecha de energía a $T = 0$ K en ausencia de impurezas. Entonces la ecuación (3.74) resulta en:

$$-\ln\left(\frac{T_c}{T_{c0}}\right) = \frac{\pi^2}{2} \frac{\Delta_{00}\Gamma^+}{2\Delta_{00}\pi T_c} = \frac{\zeta}{4\pi} \frac{\Delta_{00}}{T_c} , \quad (3.75)$$

despejando ζ de (3.75)

$$\zeta = -\frac{4\pi}{1,764} \ln\left(\frac{T_c}{T_{c0}}\right) , \quad (3.76)$$

(3.76) puede sustituirse en (3.73) y (3.70) y así se tendrá una expresión para la densidad residual en función de la temperatura.

Capítulo 4

Resultados

Los cálculos en este capítulo se han obtenido implementando algunas rutinas numéricas en language *c*, tales como: *rtbis*, para hallar raíces en una función mediante el método de bisección; *qromb*, para calcular integrales, implementando el método de Romberg [30], entre otras. La mayor dificultad surge para calcular $\tilde{\omega}$ en la ecuación (3.19), por su componente compleja y la dependencia de si misma, contenida en $g(\tilde{\omega})$. Para ello, se usa una rutina que implementa el algoritmo de Levenberg-Marquardt [31, 32], que resuelve el problema minimización de $\tilde{\omega}$. Este programa genera una data con la parte real y la parte imaginaria de $\tilde{\omega}$, y esta data puede usarse para calcular $N(\tilde{\omega})/N_F$, ecuación (3.65).

Para los parámetros de la energía en el estado normal, usando la aproximación de enlace fuerte, se usan los valores $t = 0,2 \text{ meV}$ y $\epsilon_0 = 0,4 \text{ meV}$. Sin bien las rutinas cuentan con opciones para variar cualquier parámetro, para ciertos valores podrían no converger satisfactoriamente. Cada programa genera datos que luego son implementados para generar las gráficas.

4.1. Brecha de Energía

La gráfica 4.1(a) muestra el comportamiento de la brecha de energía en función de la temperatura crítica para el límite unitario, descrita por la ecuación (3.56). Cuando no hay presencia de impurezas, es decir, para $\Gamma^+ = 0,0 \text{ meV}$ (donde Γ^+ es directa-

mente proporcional a la densidad de impurezas n_{imp} , generalmente en la literatura se hace referencia a ambos como sinónimos por simplificación), la temperatura crítica T_c es igual a la temperatura crítica sin impurezas T_{c0} , lo cual es evidente al notar que estando T_c normalizada por T_{c0} el máximo valor alcanzado por $T_c/T_{c0} = 1$.

En presencia de impurezas se han trazado curvas fijando valores $\Gamma^+ = 0, 1 \text{ meV}$, $\Gamma^+ = 0, 2 \text{ meV}$, $\Gamma = 0, 3 \text{ meV}$ y $\Gamma^+ = 0, 4 \text{ meV}$. Para estos valores se observa un decaimiento en la temperatura crítica a medida que aumenta Γ^+ . Similarmente, la brecha de energía $\Delta(T)$, normalizada por Δ_{00} , decae con el aumento de Γ^+ . En superconductores de alta temperatura se ha observado este comportamiento en sistemas YBCO dopado con Zn [33].

Para una mejor perspectiva del decaimiento de la brecha se ha trazado la gráfica 4.1(b), en este caso no se ha normalizado el valor de brecha, para el límite unitario y distintos valores de concentración de impurezas. Nuevamente, se aprecia el decaimiento del valor de la brecha a medida que aumenta Γ^+ .

Los resultados de las gráficas 4.1(a) y 4.1(b) se han conseguido bajo el límite unitario ($c = 0$), a saber, el límite en la cual el potencial de dispersión es muy grande ($U_0 \rightarrow \infty$). Es conveniente, entonces, una comparación con un potencial de dispersión para $c \neq 0, 0$. En este sentido se han trazado las gráficas 4.2(a) y 4.2(b) con $c = 0, 4$. Como antes, la temperatura crítica T_c reducida por T_{c0} decae con el aumento de Γ^+ , igual que $\Delta(T)/\Delta_{00}$, pero en esta ocasión mas lentamente que con $c = 0$. Por ejemplo, se puede notar a $\Delta(T)/\Delta_{00} = 0$ que para $c = 0, 4$, $T_c/T_{c0} \approx 0, 8$, con una $\Gamma^+ = 0, 3 \text{ meV}$ mientras que para $c = 0, 0$, $T_c/T_{c0} \approx 0, 75$, con el mismo valor de Γ^+ .

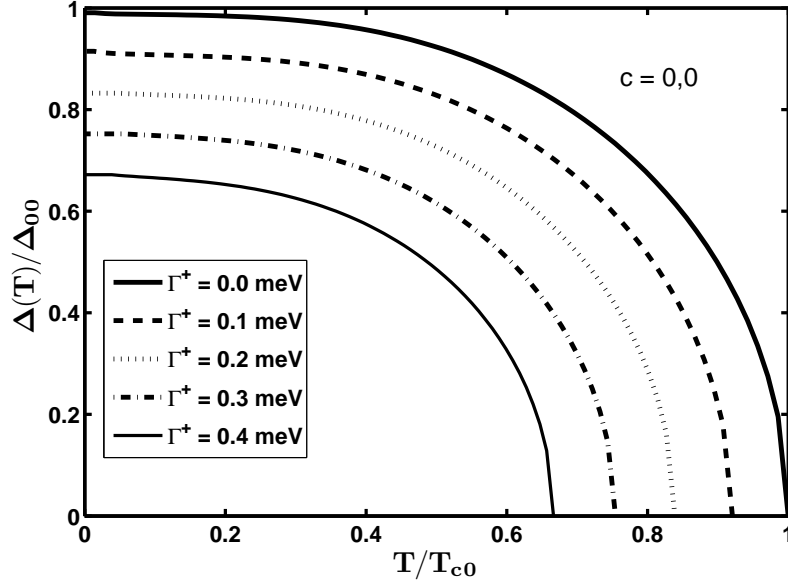
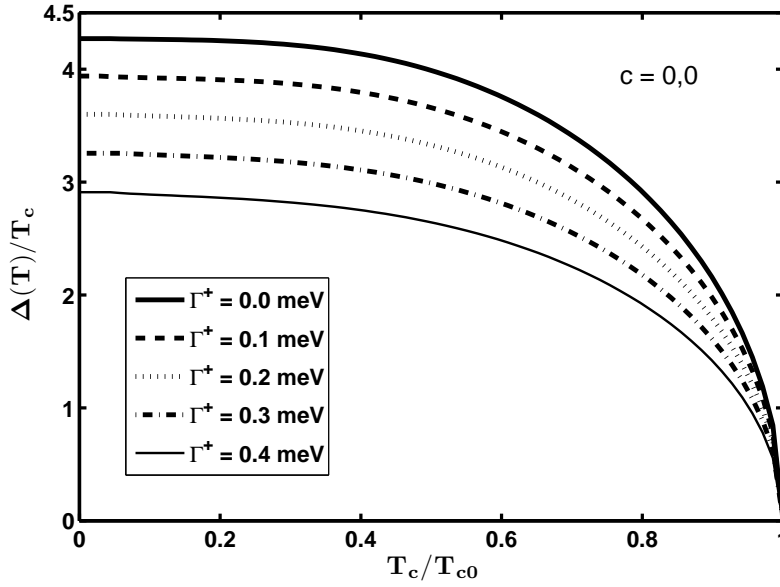
(a) $\Delta(T)/\Delta_{00}$ vs T/T_{c0} (b) $\Delta(T)/T_c$ vs T/T_c

Figura 4.1: Brecha de Energía en función de la Temperatura reducida para distintos valores de Γ^+ , en el límite Unitario

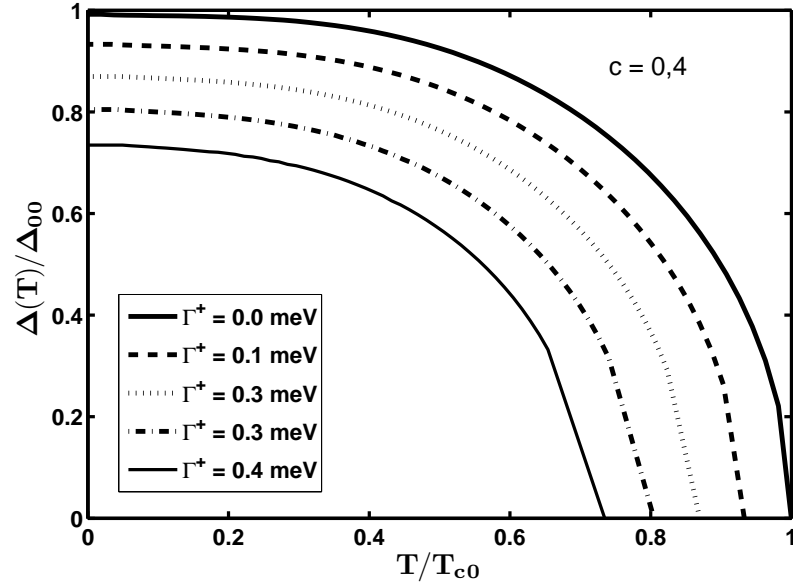
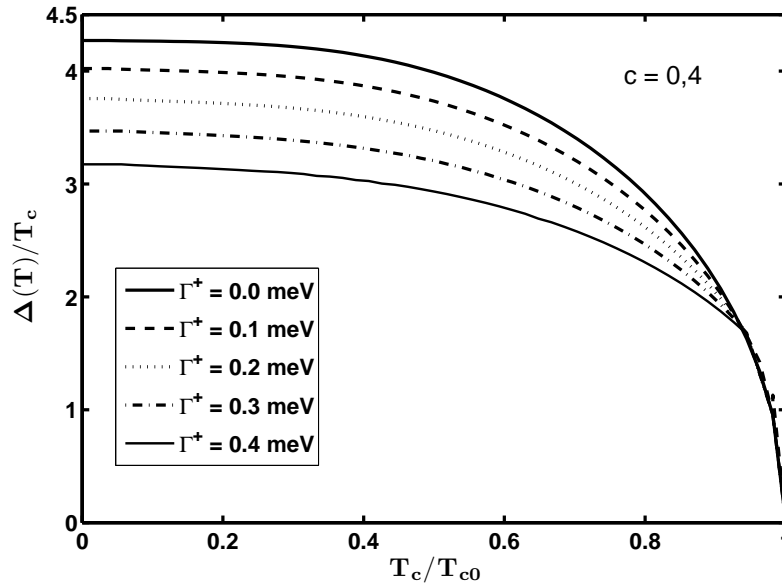
(a) $\Delta(T)/\Delta_{00}$ vs T/T_{c0} (b) $\Delta(T)/T_c$ vs T/T_c

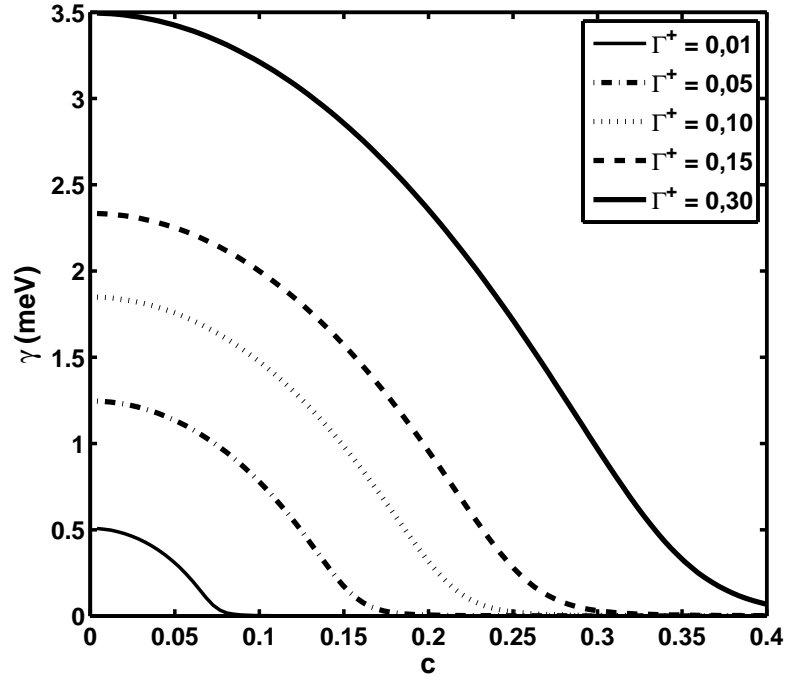
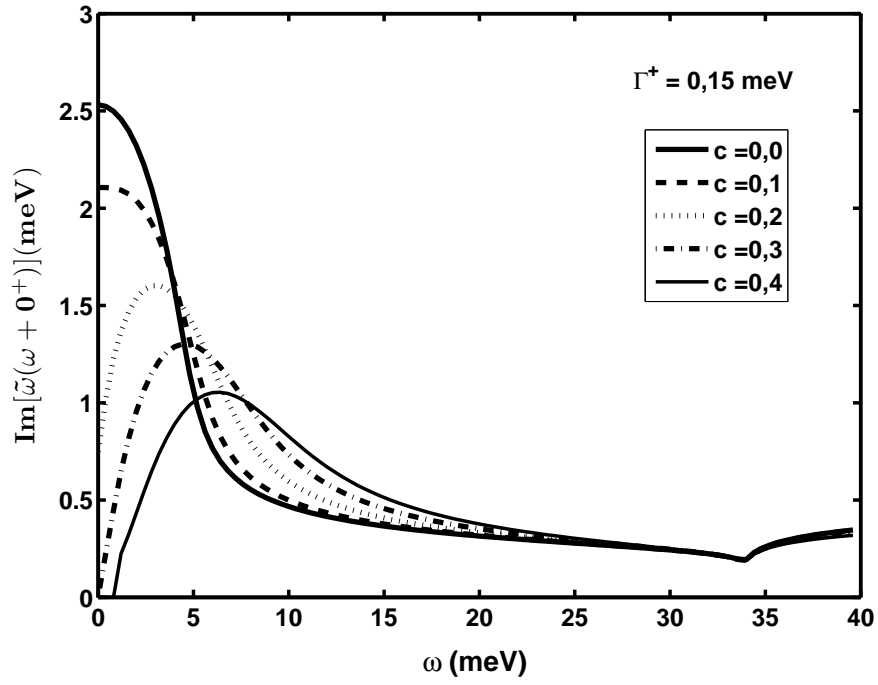
Figura 4.2: Brecha de Energía en función de la Temperatura para distintos valores de Γ^+ , en el límite Born, con $c = 0,4$

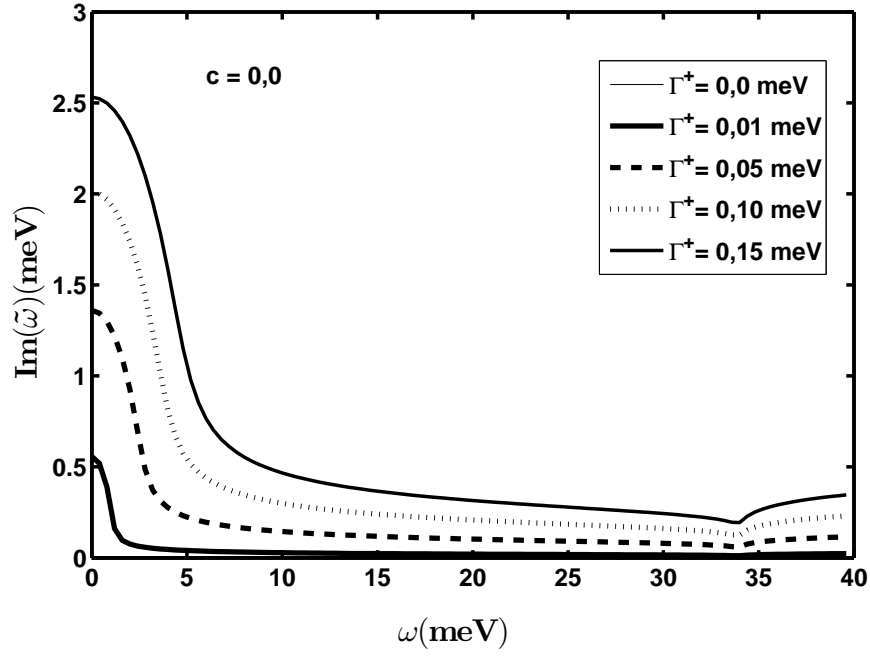
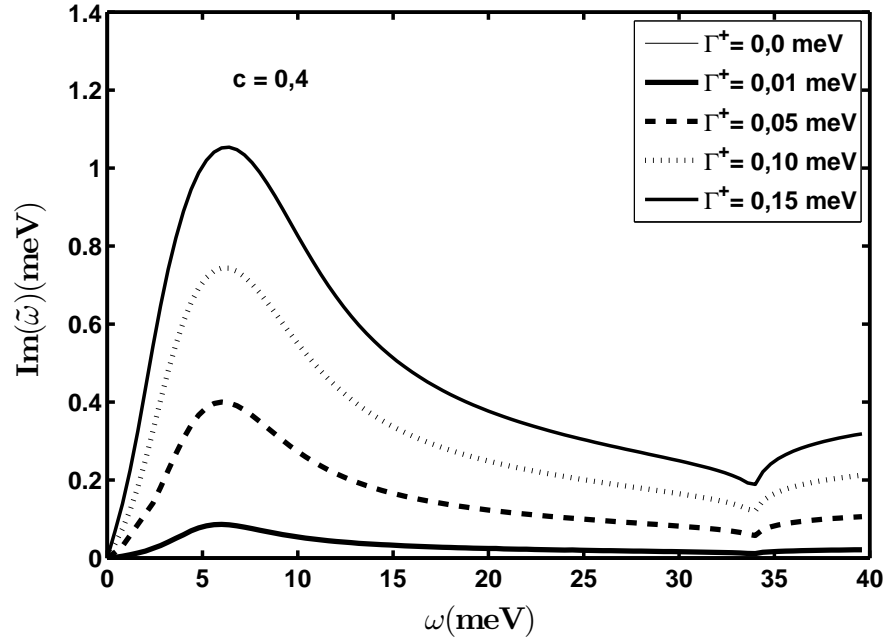
4.2. Tiempo de vida media de la cuasipartícula

Se ha visto que la parte imaginaria de la ecuación (3.19) define el llamado tiempo de vida media τ_s de las cuasipartículas como $Im(\omega) = 1/(2\tau_s)$. Haciendo $\omega = 0 \text{ meV}$ en (3.19) se obtiene γ (ver ecuación (3.25)). La gráfica 4.3(a) muestra la respuesta de γ en función de c para distintos valores de Γ^+ . A mayor potencial de dispersión ($c \rightarrow 0$) aumenta γ . Para $\Gamma^+ = 0,30 \text{ meV}$ se obtienen los máximos valores comparado con la siguiente curva, $\Gamma^+ = 0,15 \text{ meV}$, y hay una tendencia en ese sentido para aquellas con $\Gamma^+ = 0,10 \text{ meV}$, $\Gamma^+ = 0,05 \text{ meV}$ y $\Gamma^+ = 0,01 \text{ meV}$. El parte imaginaria de $\tilde{\omega}$ a $\omega = 0 \text{ meV}$ es $Im(\gamma) = 1/(2\tau_s)$, lo cual quiere decir que a mayor concentración de impurezas el tiempo de vida de los pares de Cooper decaerá mas rápidamente para $c \rightarrow 0$.

La gráfica 4.3(b) muestra la dependencia la parte imaginaria de $\tilde{\omega}$ con respecto a la frecuencia, dada por la ecuación (3.19). Estas curvas han sido calculadas con $\Gamma^+ = 0,15 \text{ meV}$. Para $c = 0$, $Im(\tilde{\omega})$ alcanza su máximo en $\omega = 0$. Para pequeños potenciales de dispersión ($c \rightarrow \infty$), como en las curvas con $c = 0,3$ y $c = 0,4$, sus máximos se ubica en $\omega \neq 0$. Cerca de $\omega = 25 \text{ meV}$ las curvas convergen y ya para $\omega \rightarrow \infty$ el comportamiento de $Im(\tilde{\omega})$ es similar con distintos valores de c .

También se han hecho calculos para distintas concentraciones de impurezas en los límites Unitario, gráfica 4.3(c), y de Born, gráfica 4.3(d). Para $c = 0,0$ a mayor concentración de impurezas el valor de las imaginarias son mayores, es decir, τ_s disminuye. En este caso los máximos por cada valor de impureza de $Im(\tilde{\omega})$ se localizan a $\omega = 0,0 \text{ meV}$, y luego disminuye con el aumento de la frecuencia. Para $c = 0,4$, si bien tiene el mismo comportamiento que en el límite unitario con respecto a la concentración de impurezas, estos máximos no se localizan en $\omega = 0,0 \text{ meV}$. Este comportamiento no es bien entendido y, si bien está fuera del alcance de este trabajo, puede ser propuesto para su análisis en un proximo trabajo.

(a) γ en función de c (b) $\text{Im}(\tilde{\omega})$ para distintos valores de c en función de ω

(c) $\text{Im}(\tilde{\omega})$ vs ω en el límite unitario.(d) $\text{Im}(\tilde{\omega})$ vs ω en el límite de Born.**Figura 4.3:** $\text{Im}(\tilde{\omega})$ para distintos valores de Γ^+ en función de ω .

4.3. Densidad de Estados

En la gráfica 4.4 se muestra la densidad de estados, normalizada por la densidad de estados en el nivel de Fermi ($N(\omega)/N_F$), sin impurezas ($\zeta = \Gamma^+/\Delta_0 = 0$) en función de frecuencia reducida (ω/Δ_0). Se observa que a cero energía no existen estados ocupados. Luego, la cantidad de estados ocupados empieza a crecer rápidamente hasta un valor de energía exactamente igual al de la Brecha, en $\omega = \Delta_0$, donde se produce una divergencia llamada *Singularidad de Van Hove*. En superconductores convencionales la densidad de estados presenta una singularidad para $\omega = \Delta_0$, y para valores de frecuencias por debajo de Δ_0 es una región prohibida.

La gráfica 4.5(a) muestra curvas para distintos valores de ζ en el límite de dispersión fuerte ($c = 0,0$). A cero frecuencia se observa como existen estados residuales, que es consecuencia de la presencia de impurezas, lo cual es evidente al notar que a mayor concentración de impurezas aumenta la cantidad de estados ocupados a $\omega = 0,0 \text{ meV}$. Para un potencial de dispersión mas débil, por ejemplo, con $c = 0,4$ (ver figura 4.5(b)), si bien aumenta la cantidad de estados residuales a mayor ζ , en este caso es menor si se compara con aquellas en la gráfica 4.5(a) con $c = 0,0$, lo cual sugiere que un potencial de dispersión fuerte produce mas estados ocupados a cero energía.

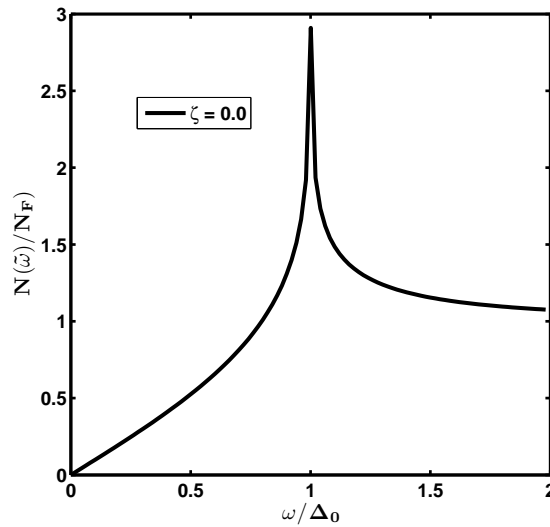
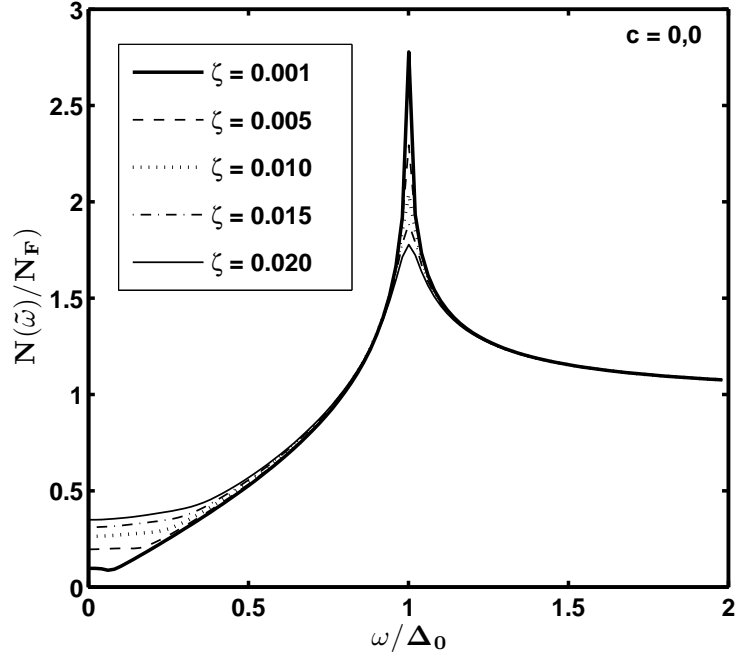
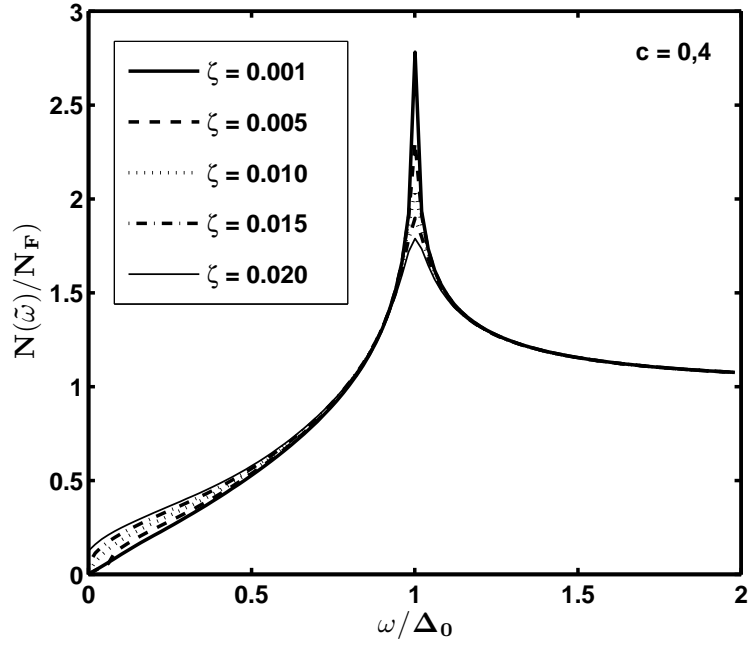


Figura 4.4: Densidad de Estados sin impurezas, $\zeta = 0,0$



(a) Densidad de estados para el límite Unitario



(b) Densidad de estados para el límite Born

Figura 4.5: Densidad de Estados normalizada en función de la frecuencia reducida por Δ_0 para distintos valores ζ

Se ha visto como la concentración de impurezas suprime la temperatura crítica y la Brecha. La Densidad Residual de Estados también cambia en función de la temperatura, como se ha estudiado en 3.4. Mas conveniente es simplificar el análisis al límite de dispersión débil (ver ecuación 3.73) y el límite de dispersión fuerte (ver ecuación 3.70). Estos resultados se muestran en la gráfica 4.6. A cero T_c es la mayor la Densidad Residual, y a medida que T_c aumenta cae la densidad de estados a cero frecuencia, mas rápidamente para un potencial de dispersión fuerte (límite de Born).

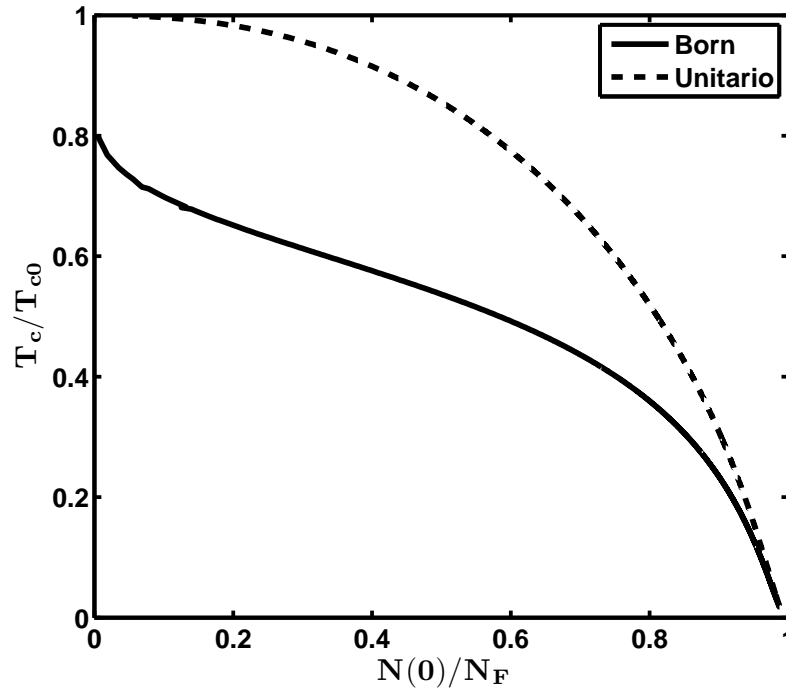


Figura 4.6: Densidad residual de estados en función de la temperatura crítica reducida

La gráfica 4.7 muestra algunos resultados para el compuesto $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-y}\text{Zn}_y\text{O}_4$, obtenidos por [34] mediante medidas del calor específico electrónico. Son remarcables los resultados con $x = 0, 22$ que coinciden con mucha precisión para la curva teórica en el límite unitario.

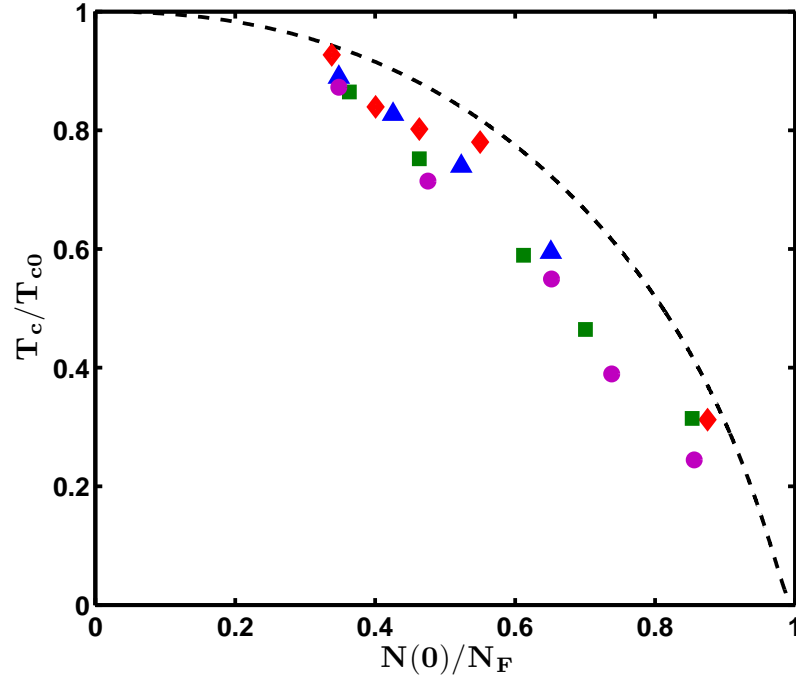


Figura 4.7: T_c/T_{c0} vs $N(0)/N_F$. Datos experimentales para el compuesto $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-y}\text{Zn}_y\text{O}_4$. \bullet $x = 0, 10$, \blacksquare $x = 0, 18$, \blacktriangle $x = 0, 20$, \blacklozenge $x = 0, 22$

Conclusiones

Han sido estudiados importantes aspectos de los superconductores de alta temperatura. En la sección 2.2 se estudiaron las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes, de las cuales se obtiene el espectro de energía para un superconductor con simetría $d_{x^2-y^2}$, considerando la interacción entre primeros vecinos para una red bidimensional. En el capítulo 3 se ha introducido la técnica de Edwards que describe el efecto de las impurezas no magnéticas en un metal. Esta teoría permitió un análisis de algunas propiedades de estos superconductores incluyendo el efecto de impurezas no magnéticas. Esto hizo posible, por ejemplo, reproducir algunos resultados, con pequeñas diferencias, del trabajo de E. Schachinger y J. P. Carbotte [20], pero distinto a estos, usando la aproximación de enlace fuerte, lo cual es un buen indicio de su implementación.

Se ha calculado en el capítulo 4 el tiempo de vida medio de los pares de Cooper. En el límite Unitario el menor tiempo de vida se obtiene a cero energía, distinto al límite de Unitario. Este comportamiento en el límite Unitario no es bien entendido. Los cálculos para la densidad de estados muestran que la cantidad de estados residuales es mayor en el límite unitario. También se han representado cálculos para la densidad residual en función de la temperatura reducida en ambos límites. La curva para el límite unitario ha sido comparada con resultados experimentales obtenidos por M. Momono y M. Ido [34] mediante medidas del calor específico electrónico en el compuesto $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{Cu}_{1-y}\text{Zn}_y\text{O}_4$, existe una apreciable coincidencia con $x = 0,22$.

Apéndice A

Promedio sobre la Superficie de Fermi

Véase la siguiente fórmula

$$\frac{1}{2x} \tanh(x/2) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^2 \pi^2 + x^2} \quad , \quad (1)$$

sustituyendo (1) en (3.48)

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{g}{TN} \sum_k \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\phi_k^2}{(2n+1)^2 \pi^2 + (E_k/T)^2} \quad , \\ 1 &= \frac{gT}{N} \sum_k \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\phi_k^2}{\left[(2n+1)T\pi\right]^2 + \xi_k^2 + \Delta_k^2} \quad . \end{aligned} \quad (2)$$

En una buena aproximación se puede tomar

$$\frac{1}{N} \sum_k = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|} \int d\xi \quad , \quad (3)$$

con $N_F = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|}$, la densidad de estados en el nivel de Fermi. Haciendp $\omega_n = (2n+1)T\pi$, (2) se reescribe como

$$1 = gT \sum_n \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|} \int d\xi \frac{\phi_k^2}{\omega_n^2 + \xi_k^2 + \Delta_k^2} \quad , \quad (4)$$

con $\Lambda^2 = w_n^2 + \Delta_k^2$

$$\begin{aligned} 1 &= gT \sum_n \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|} \int d\xi \frac{\phi_k^2}{\xi_k^2 + \Lambda^2} = gT \sum_n \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|} \int d\xi \frac{\phi_k^2}{(\xi_k + i\Lambda)(\xi_k - i\Lambda)} , \\ 1 &= gT \sum_n \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|} \phi_k^2 \int d\xi \frac{1/(\xi_k + i\Lambda)}{(\xi_k - i\Lambda)} . \end{aligned} \quad (5)$$

por el Teorema de Cauchy

$$\int d\xi \frac{1/(\xi_k + i\Lambda)}{(\xi_k - i\Lambda)} = 2\pi i \left(\frac{1}{2i\Lambda} \right) = \frac{\pi}{\Lambda} ,$$

sustituyendo en (5)

$$\begin{aligned} 1 &= gT \sum_n \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|} \frac{\phi_k^2}{\Lambda} = gT\pi \frac{N_F}{N_F} \sum_n \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|} \frac{\phi_k^2}{\sqrt{w_n^2 + \Delta_k^2}} , \\ \frac{1}{gN_F} &= \frac{T\pi}{N_F} \sum_n \frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{dS_F}{|\mathbf{v}_k|} \frac{\phi_k^2}{\sqrt{w_n^2 + \Delta_k^2}} = \frac{T\pi}{\langle \phi_k^2 \rangle} \sum_n \left\langle \frac{\phi_k^2}{\sqrt{w_n^2 + \Delta_k^2}} \right\rangle_{SF} , \end{aligned} \quad (6)$$

(6) es la ecuación de la Brecha autoconsistente promediada en la superficie de Fermi, esta forma es apropiado para simplificar los cálculos mediante el empleo de análisis numérico. $\mathbf{v}_k = \nabla_k \xi_k$ son las llamadas velocidades de Fermi, con ξ_k la energía (2.38) del estado normal .

La integral $\int dS_F$ puede ser simplificada llevandola a una integral unidimensional, donde $dS_F = \sqrt{dk_x^2 + dk_y^2}$, la cual puede ser reescrita como

$$dS_F = \sqrt{1 + \left(\frac{dk_y}{dk_x} \right)^2} dk_x , \quad (7)$$

haciendo cero la energía (2.38)

$$0 = \epsilon_0 + 2t (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) , \quad (8)$$

esto permite escribir k_y como función de k_x , $k_y = f(k_x)$. Calculando la derivada $dk_y a / dk_x a$ se obtiene un diferencial (7) en función de k_x

$$\cos(k_y a) = -\frac{\epsilon_0}{2t} - \cos(k_x a) , \quad (9)$$

$$k_y = \frac{1}{a} \arccos \left(\frac{\epsilon_0}{2t} - \cos(k_x a) \right) , \quad (10)$$

$$\frac{dk_y a}{dk_x a} = \frac{dk_y}{dk_x} = \frac{-\sin(k_x a)}{\sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon_0}{2t} - \cos(k_x a) \right)^2}} = \frac{-2t \sin(k_x a)}{\sqrt{(4t)^2 - (\epsilon_0 - \cos(k_x a))^2}} . \quad (11)$$

Sustituyendo (11) en (7) se consigue una integral unidimensional.

$$|\mathbf{v}_k| = \sqrt{v_{k_x}^2 + v_{k_y}^2}, \text{ calculando } v_{k_x} \text{ y } v_{k_y}$$

$$v_{k_x} = \frac{\partial \xi_k}{\partial k_x} = -2at \sin(k_x a) , \quad (12)$$

$$v_{k_y} = \frac{\partial \xi_k}{\partial k_y} = -2at \sin(k_y a) , \quad (13)$$

al sustituir $\sin(k_y a) = \sqrt{1 - \cos^2(k_y a)}$, usando (9) v_{k_y} estará en función de k_x ,

$$v_{k_y} = -2at \sqrt{1 - \cos^2(k_y a)} = -2at \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon_0}{2t} + \cos(k_x a) \right)^2} , \quad (14)$$

sustituyendo (12) y (14) en $|\mathbf{v}_k|$

$$|\mathbf{v}_k| = 2at \sqrt{\sin^2(k_x a) + 1 - \left(\frac{\epsilon_0}{2t} + \cos(k_x a) \right)^2} . \quad (15)$$

Apéndice B

Parte real de la densidad de estados

Introduciendo los cambios de variable (3.62) , (3.63) y (3.64) en la ecuación (3.61) se obtiene

$$\frac{N(\tilde{\omega})}{N_F} = \text{Re}(\omega + i\alpha) \left\langle \frac{1}{\sqrt{a_k + ib_k}} \right\rangle_{SF} . \quad (16)$$

Por D'Moivre $a_k + ib_k = \sqrt{|a_k|^2 + |b_k|^2} e^{i\varphi_k}$. Haciendo $\rho_k = \sqrt{|a_k|^2 + |b_k|^2}$, entonces $a_k + ib_k = \rho_k e^{i\varphi_k}$. Introduciendo estos cambios en (16) se obtiene

$$\frac{N(\tilde{\omega})}{N_F} = \text{Re}(\omega + i\alpha) \left\langle \frac{e^{-i\varphi_k/2}}{\sqrt{\rho_k}} \right\rangle_{SF} , \quad (17)$$

sustituyendo $e^{-i\varphi_k/2} = \cos(\varphi/2) - i \sin(\varphi/2)$

$$\begin{aligned} \frac{N(\tilde{\omega})}{N_F} &= \text{Re}(\omega + i\alpha) \left\langle \frac{1}{\sqrt{\rho_k}} [\cos(\varphi/2) - i \sin(\varphi/2)] \right\rangle_{SF} , \\ &= \left\langle \frac{\omega}{\sqrt{\rho_k}} \cos(\varphi/2) - i \frac{\omega}{\sqrt{\rho_k}} \sin(\varphi/2) + i \frac{\alpha}{\sqrt{\rho_k}} \cos(\varphi/2) + \frac{\alpha}{\sqrt{\rho_k}} \sin(\varphi/2) \right\rangle , \end{aligned} \quad (18)$$

tomando la parte real de la ecuación (18)

$$\frac{N(\tilde{\omega})}{N_F} = \left\langle \frac{\omega}{\sqrt{\rho_k}} \cos(\varphi/2) + \frac{\alpha}{\sqrt{\rho_k}} \sin(\varphi/2) \right\rangle ,$$

usando la identidad trigonométrica $\sin(\varphi/2) = \sqrt{(1 - \cos \varphi_k)/2}$, y al sabiendo que $\cos \varphi_k = a_k/\rho_k$, se llega a la ecuación (3.65).

Apéndice C

Desacoplando las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes

Partiendo de la ecuación (2.37) se obtiene

$$\xi_k u_k + \Delta_k v_k = E_k u_k \quad , \quad (19)$$

$$\Delta_k u_k - \xi_k v_k = E_k v_k \quad , \quad (20)$$

(19) y (20) son de gran utilidad para determinar la ecuación de la brecha. Mediante algunos artificios se pueden desacoplar estas ecuaciones que resultan en las siguientes

$$v_k = \frac{E_k - \xi_k}{\Delta_k} u_k \quad y \quad u_k = \frac{E_k + \xi_k}{\Delta_k} v_k \quad , \quad (21)$$

multiplicando por u_k y v_k respectivamente,

$$u_k v_k = \frac{E_k - \xi_k}{\Delta_k} u_k^2 \quad y \quad v_k u_k = \frac{E_k + \xi_k}{\Delta_k} v_k^2 \quad , \quad (22)$$

también para (2.41) y (2.42)

$$\xi_k u_k^2 + \Delta_k u_k v_k = E_k u_k^2 \quad , \quad (23)$$

$$\Delta_k v_k u_k - \xi_k v_k^2 = E_k v_k^2 \quad , \quad (24)$$

sumando (23) y (24)

$$\xi_k (u_k^2 - v_k^2) + 2\Delta_k u_k v_k = E_k (u_k^2 + v_k^2) \quad , \quad (25)$$

por la condición de normalización en (2.32)

$$\xi_k (2u_k^2 - 1) + 2\Delta_k u_k v_k = E_k \quad , \quad (26)$$

sustituyendo convenientemente una de las igualdades de (22)

$$\begin{aligned} \xi_k (2u_k^2 - 1) + 2\Delta_k \left(\frac{E_k - \xi_k}{\Delta_k} \right) u_k^2 &= E_k \quad , \\ 2\xi_k u_k^2 - \xi_k + 2(E_k - \xi_k) u_k^2 &= E_k \quad , \end{aligned} \quad (27)$$

luego de unos arreglos algebraicos se obtiene para u_k

$$2u_k^2 = 1 + \frac{\xi_k}{E_k} \implies u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \right)} \quad , \quad (28)$$

nuevamente, usando la condición de normalización

$$\begin{aligned} v_k^2 &= 1 - u_k^2 = 1 - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \right) \quad , \\ v_k &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}} \right)} \quad , \end{aligned} \quad (29)$$

haciendo el producto $v_k^2 u_k^2$, se llega a

$$\begin{aligned} v_k^2 u_k^2 &= \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} + \frac{\xi_k}{E_k} + \frac{\xi_k^2}{E_k^2} \right) = \frac{1}{4} \left(\frac{\Delta_k^2}{E_k^2} \right) \quad , \\ v_k u_k &= \frac{1}{2} \frac{\Delta_k}{E_k} \quad . \end{aligned} \quad (30)$$

Referencias

- [1] H. Kamerlingh Onnes. *Leiden Comm.*, 120b, 122b, 124c, 1991.
- [2] W. Meissner and R. Ochsenfeld. *Naturwissenschaften*, 21(787), 1933.
- [3] Dirk van Delft and Peter Kes. The discovery of superconductivity. *Physics Today*, 2010.
- [4] F. and H. London. *Proc. Roy. Soc*, A149, 1935.
- [5] V. L. Ginzburg and L. D. Landau. *Zh. Eksperim. i Teor. Fiz*, 20(1064), 1950.
- [6] Shoji Tanaka. High-Temperature Superconductivity: History and Outlook. *JSAP International*, (4):17–22, 2001.
- [7] J. G. Bednorz and K. A. Mller. Possible High Tc Superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Zeitschrift fr Physik B*, 64:189–193, 1986.
- [8] James F. Annett. Unconventional Superconductivity. *Contemporary Physics*, 36(6):423–437, 1995.
- [9] C. C. Tsuei and J. R. Kirtley. Pairing symmetry in cuprate superconductors. *Reviews of Modern Physics*, 72(4), 2000.
- [10] M. Brian Maple. *High Temperature Superconductivity*.
- [11] David Eichenberger. *Superconductivity and antiferromagnetism in the two-dimensional Hubbard model*. PhD thesis, Fribourg, 2008.
- [12] Ari Deibert Palczewski. *Angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) studies of cuprate superconductors*. PhD thesis, Iowa State University, 2010.

-
- [13] Landau y Lifshitz. *Mecánica Cuántica no relativista*, chapter 9. Editorial Reverté, 1983.
 - [14] Manfred Sigrist. *Solid State Theory*, 2013. Institut für Theoretische Physik, ETHZ, Zurich.
 - [15] Manfred Sigrist. *Introduction to Unconventional Superconductivity*, 2013. Institut für Theoretische Physik, ETHZ, Zurich.
 - [16] P. G. De Gennes. *Superconductivity of Metals and Alloys*. Westview Press, 1990.
 - [17] C. Cohen Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum Mechanics*, volume 2, chapter 9. Wiley-Vch, 2005.
 - [18] Y. Nambu. *Physicall Review*, 117(3), 1960.
 - [19] Albert Messiah. *Quantum Mechanics*, volume II. 1965.
 - [20] E. Schachinger and J. P. Carbotte. *Physical Review B*, 67, 2003.
 - [21] Nikolai B. Kopnin. *Theory of Nonequilibrium Superconductivity*, chapter 1, page 15. Oxford University Press, 2001.
 - [22] P. W. Anderson. Theory of dirty superconductors. *J. Phys. Chem. Solids*, 1959.
 - [23] V. P. Mineev and K. V. Samokin. *Introduction to Unconventional Superconductivity*. 1998.
 - [24] E. Puchkaryov and K. Makia. Impurity scattering in d-wave superconductivity. unitarity limit versus born limit. *Eur. Phys. J. B*, 1997.
 - [25] S. F. Edwards. The electronic structure of disordered systems. *Philosophical Magazine*, pages 617–638, 1961.
 - [26] J. Rammer. *Quantum Transport Theory*. Frontiers in Physics, 1998.
 - [27] Michael Tinkham. *Introduction to Superconductivity*. McGraw-Hill, 1996.
 - [28] Tom Timusk. The Superconducting Energy Gap. *La Physique au Canada*, 67(2), 2011.

-
- [29] Richard Feynman. *Statistical Mechanics*, chapter 2, page 67. 1981.
 - [30] *Numerical Recipes in C*. CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS, 2002.
 - [31] Kenneth Levenberg. *Quarterly of Applied Mathematics*, page 164168, 1944.
 - [32] Donald Marquardt. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 11:431441, 1963.
 - [33] Takashi Hotta. *Journal of The Physical Society of Japan*, 62(1), 1993.
 - [34] M. Momono and M. Ido. *Physica C*, 1996.