

**ENERGÍA DE CONFINAMIENTO DE SUPERCONDUCTORES
MESOSCÓPICOS CILÍNDRICOS CON CAMPO MAGNÉTICO
AXIAL**



TRABAJO DE GRADO

Para optar el título profesional de:

Físico

JOSÉ ALBERTO RAMÍREZ ESPAÑA

Universidad de Nariño
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física
San Juan de Pasto, Colombia
Septiembre 2017

**ENERGÍA DE CONFINAMIENTO DE SUPERCONDUCTORES
MESOSCÓPICOS CILÍNDRICOS CON CAMPO MAGNÉTICO
AXIAL**

JOSÉ ALBERTO RAMÍREZ ESPAÑA

TRABAJO DE GRADO

Director:

Alfredo Pasaje Salcedo
PhD en Ciencias Físicas

Universidad de Nariño
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Física
San Juan de Pasto, Colombia
Septiembre 2017

©2017 - JOSÉ ALBERTO RAMÍREZ ESPAÑA

“Las ideas y conclusiones aportadas en la tesis de grado son responsabilidad exclusiva de los autores”

Artículo 1. del acuerdo No. 324 del 11 de Octubre de 1966, emanado por el Honorable Consejo Directivo de la Universidad de Nariño.

Todos los derechos reservados.

Nota de Aceptación

Alfredo Pasaje Salcedo

Director

Germán Enrique Ramos

Jurado

Yithsbey L. Giraldo Úsuga

Jurado

San Juan de Pasto, Septiembre 2017

Agradecimientos

A Dios y a mis padres por su constante compromiso en mi formación como profesional y su apoyo incondicional.

Cuando tomamos cierto interés en los grandes descubridores y en sus vidas es cuando la ciencia se hace soportable, y sólo cuando rastreamos el desarrollo de las ideas es cuando se hace fascinadora.

James Clerk Maxwell

ENERGÍA DE CONFINAMIENTO DE SUPERCONDUCTORES MESOSCÓPICOS CILÍNDRICOS CON CAMPO MAGNÉTICO AXIAL

Resumen

En el marco de la teoría de Shanenko e Ivanov, se calculó la energía de confinamiento para superconductores mesoscópicos cilíndricos que están sometidos a un campo magnético axial. Para tal propósito se solucionó la ecuación de Ginzburg-Landau no lineal, mediante el siguiente método: la función de prueba Gaussiana utilizada por Luca Salasnich en su trabajo sobre bosones en discos y cilindros es generalizada, y posteriormente, se minimiza la funcional asociada a la ecuación de Ginzburg-Landau no lineal utilizando esta nueva distribución de prueba.

CONFINEMENT ENERGY OF CYLINDRICAL MESOSCOPIC WITH AXIAL MAGNETIC FIELD

Abstract

Under Shanenko and Ivanov theory, energy confinement of cylindrical mesoscopic superconductors which are subjected to an axial magnetic field is calculated. For this purpose the nonlinear Ginzburg-Landau equation is solved by the following method: Gaussian function test used by Luca Salasnich in his work on bosons discs and cylinders is widespread; and then the associated functional to nonlinear Ginzburg-Landau equation is minimized using this new distribution test.

Índice general

1. Introducción	1
2. El fenómeno de la superconductividad	4
2.1. Propiedades de los superconductores	5
2.1.1. Resistencia cero	5
2.1.2. Efecto Meissner	6
2.1.3. Destrucción de la superconductividad por campos magnéticos	7
2.2. Fundamentos básicos	8
2.2.1. Modelo inicial para metales	8
2.2.2. Oscilador armónico simple y energía de punto cero	8
2.2.3. Energía de punto cero para la red cristalina	9
2.2.4. Vibraciones de red, los fonones	9
2.2.5. Modelo del líquido de Fermi para metales, electrones de Bloch	10
2.2.6. Origen de la resistencia eléctrica y la superconductividad	11
3. Teoría BCS	13
3.1. Introducción	13
3.2. Conceptos Importantes	13
3.2.1. Operador permutación	13
3.2.2. Estados multi-partícula y el espacio de Fock	14
3.2.3. Operadores de creación y aniquilación	15
3.2.4. Relaciones de conmutación y anticonmutación	15
3.2.5. Segunda cuantización de variables dinámicas	16
3.3. Fonones de red	18
3.4. El hamiltoniano para los fonones de red	19
3.5. El hamiltoniano de interacción iones-electrones	21
3.6. Hamiltoniano de interacción electrones-fonones	22
3.7. Pares de Cooper	25
3.7.1. El problema de Cooper	25
4. Teoría de Ginzburg-Landau	28
4.1. Introducción	28
4.2. Rompimiento de simetría	28
4.3. Cambios de fase de segunda especie	29
5. Superconductividad mesoscópica	35

6. Teoría de Shanenko e Ivanov	37
7. Funcional de acción	41
8. Solución de la ecuación de Ginzburg-Landau no lineal	43
ANEXOS	50
A. Minimización de funcionales	51

Capítulo 1

Introducción

La tendencia hacia la miniaturización en dispositivos electrónicos ha marcado el desarrollo del campo de la Materia Condensada en los últimos años. Además debido a su interés tecnológico, los dispositivos de tamaño mesoscópico son de gran importancia para esta área [8].

Así, desde los últimos años se ha desarrollado una intensa actividad de investigación en torno a la observación de efectos cuánticos en sistemas superconductores mesoscópicos que poseen dimensiones comparables a la longitud de coherencia y la longitud de penetración. La longitud de coherencia se mide a partir del borde de la muestra hasta donde la función que representa la densidad de electrones deja de variar y se vuelve constante en el interior del material, y la longitud de penetración se mide a partir del borde de la muestra hasta donde el campo magnético aplicado desaparece en el interior del material.

Una de las más interesantes cualidades de los superconductores mesoscópicos es que la forma y el tamaño de los mismos afectan al campo magnético aplicado y la función de onda de los portadores de carga del superconductor. Usualmente este efecto es investigado en el marco de la teoría de Ginzburg-Landau, en la cuál, dependiendo de la simetría de la muestra, se plantea una ecuación diferencial lineal denominada Ecuación de Ginzburg Landau que está sujeta a condiciones de frontera tipo Newman. Sin embargo esta teoría que es apropiada para superconductores macroscópicos, no lo es para el estudio de los efectos que producen la forma y el tamaño de muestras superconductoras mesoscópicas.

La teoría apropiada para superconductores mesoscópico es una generalización de la teoría de Ginzburg-Landau propuesta por Shanenko e Ivanov en 2004 . En esta nueva teoría el tamaño y la forma proporcionan un incremento de la energía debido a efectos del confinamiento. Esto se ve reflejado al incluir adicionalmente en la ecuación de Ginzburg-Landau un parámetro de confinamiento α_c . Además las condiciones de frontera para esta ecuación pasan de ser de tipo Newman para ser de tipo Dirichlet.

Hasta la actualidad, en el marco de la teoría de Shanenko e Ivanov los grupos de investigación dedicados a este campo han venido realizando cálculos de la energía de confinamiento de diferentes simetrías de superconductores mesoscópicos; por ejemplo en 2007 un equipo de la Universidad del Valle, lo hizo para superconductores cilíndricos bajo campo magnético. Sin embargo para tal propósito se ha utilizado la versión lineal de la ecuación de Ginzburg-Landau.

El presente trabajo tiene como objetivo calcular la energía de confinamiento de superconductores mesoscópicos bajo campo magnético aplicado axialmente, para lo cual se resuelve la ecuación de de Ginzburg-Landau no lineal:

$$\frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{2e\vec{A}}{c} \right)^2 \Psi(\vec{r}) + (\alpha + 2V_{conf})\Psi(\vec{r}) + \beta |\Psi(\vec{r})|^2 \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (1.1)$$

sujeta a la condición de frontera:

$$\Psi(\vec{r})|_{frontera} = 0 \quad (1.2)$$

El parámetro $\Psi(\vec{r})$ de esta ecuación se denominada parámetro de orden, \vec{A} es el potencial vectorial magnético asociado al campo aplicado, V_{conf} es el potencial de confinamiento, m^* es la masa efectiva de los portadores de carga, e es la carga del electrón, c es la velocidad de la luz, α y β son los parámetros de Ginzburg que caracterizan el tipo de material de la muestra superconductora.

Este trabajo está organizado de la siguiente manera: en el capítulo dos se desarrolla algunos aspectos importantes sobre la superconductividad, en el capítulo tres se trata lo más relevante sobre la teoría BCS que explica la superconductividad desde el punto de vista de la mecánica cuántica. En el capítulo cuatro se exploran algunos detalles de la teoría de Ginzburg-Landau cuya base fundamental es la teoría de campos, en especial, el rompimiento espontáneo de simetría. En el capítulo seis en el marco de la teoría de Shanenko e Ivanov se plantea la ecuación diferencial para un superconductor cilíndrico bajo campo magnético aplicado de forma axial.

Capítulo 2

El fenómeno de la superconductividad

En en 1911 Kamerlingh-Onnes y su alumno Guilles Holst, encontraron que la resistencia eléctrica del mercurio sólido caía abruptamente a un valor muy pequeño cuando se enfriaba por debajo de cierta temperatura, que luego se denominó temperatura crítica T_c . Posteriormente en 1913 Kamerlingh-Onnes recibió el premio Nobel de física por este descubrimiento que se denominó superconductividad.

La superconductividad se presenta en sistemas de carácter metálico, es decir, en sistemas que tienen estados ocupados en una banda de conducción. Hay dos experimentos que definen la superconductividad en una muestra en volumen. El primero es la pérdida total de la resistencia a una cierta temperatura que es característica de cada superconductor y que recibe el nombre de temperatura crítica, T_c . En la Figura 1, se ilustra el resultado de una medida de la resistencia vs. temperatura en el momento del paso al estado superconductor. El segundo experimento es el efecto Meissner- Ochsenfeld, descubierto en 1933, que consiste en que una muestra expulsa el flujo magnético de su interior y, como consecuencia, flota sobre un imán, al pasar al estado superconductor.

Explicar la física de este fenómeno ha constituido un reto intelectual desde su mismo comienzo. Fue tan solo hacia 1957, a más de 45 años de su descubrimiento, que surgió la primera teoría capaz de dar cuenta de ella. La cual explica que la superconductividad es un fenómeno cuántico macroscópico que requirió, para su explicación, de la aparición de la Mecánica cuántica, de la teoría cuántica de campos, del descubrimiento del Principio de Pauli y de la superficie de Fermi en los metales, hechos que se conocieron y conjuntaron solamente hasta la década de los cincuenta

del Siglo XX. La aparición del efecto isótopo que consiste en que la temperatura crítica, T_c , más abajo de la cual aparece la superconductividad, depende de la masa del isótopo (átomo idéntico pero con diferente masa). Este hecho indicó el camino para describir el fenómeno como un efecto de interacción entre los electrones y la red (electrón-fonón) descrita por Frölich [3]. Pero fue solo cuando Cooper [4] describió el efecto que una atracción de cualquier origen tiene sobre un par de electrones situados sobre un mar de Fermi (ver más abajo) que Bardeen comprendió que estaba enfrente de la clave de la superconductividad. Así surgió en 1957 la Teoría BCS (de los nombres de sus investigadores: John Bardeen, Leon Cooper y John Schrieffer) [5] y muy poco después, su extensión, las ecuaciones de Eliashberg [6] que dieron cuenta exacta de todos los superconductores convencionales.

Muy importante es la teoría de Ginzburg-Landau [24], descubierta en 1950, que ha sido muy fructífera para el tratamiento teórico de la superconductividad. La teoría trata de manera general, las transiciones de fase y se aplica muy bien a la superconductividad. Puede mostrarse que coincide con la BCS en el régimen que corresponde cerca de T_c .

Propiedades de los superconductores

Resistencia cero

Al aplicarle corriente continua a una muestra en fase superconductora, esta circula sin ninguna resistencia. Para entender cómo se logra llegar a esa fase superconductora, es necesario analizar las distintas interacciones que se producen a nivel subatómico.

Al aplicarse una diferencia de potencial sobre un metal (que tienen cargas eléctricas libres), se produce un movimiento de estos portadores de carga conformando

la corriente eléctrica. Al desplazarse por el material, los electrones colisionan con los iones que conforman el entramado cristalino y se encuentran vibrando fuera de su posición de equilibrio. Como la temperatura corresponde a una medida de las vibraciones mencionadas, resulta natural esperar que al incrementar la temperatura tengamos un aumento de la resistencia eléctrica como consecuencia de una mayor cantidad de choques, favorecidos por el incremento de las vibraciones de los iones.

Analizando la dependencia de la temperatura y la resistencia, podemos concluir que al disminuir la temperatura, se reducirá la resistencia eléctrica. Según el modelo de Sommerfeld, el comportamiento del metal es similar al de los gases de electrones. Se esperaba entonces que al enfriar un material conductor, sus electrones tuvieran comportamientos similares a los observados para los gases, por lo que se esperaba que podría existir una temperatura por debajo de la cual se iban a condensar, formando un líquido de electrones y hasta eventualmente un sólido.

Desde entonces se fueron utilizando distintos gases que en estado líquido podrían enfriar a la muestra a temperaturas cercanas a los 0K. El holandés Kamerlingh Onnes logró comprobar la reducción de la resistividad a medida que disminuía la temperatura. En 1911, utilizando helio líquido como refrigerante, notó que a temperaturas cercanas a los 4K la resistencia eléctrica de la muestra de mercurio (Hg), se hizo abruptamente cero. Esto causó sorpresa en la comunidad científica, por que aunque se esperaba que la resistencia disminuyera, no se contaba que esta caería hasta ser nula, y aún más de forma abrupta.

Efecto Meissner

Un material superconductor al ser expuesto a un campo magnético débil, el mismo penetra únicamente una pequeña distancia λ , llamada la penetración profunda de London, decayendo exponencialmente a cero dentro del material. Este fenómeno es llamado el efecto Meissner. Analíticamente, el campo magnético decae exponen-

cialmente desde cualquier valor de la superficie según :

$$H = \exp\left(\frac{1}{\lambda}r\right) \quad (2.1)$$

donde H es el campo magnético aplicado y λ es la longitud de penetración.

Destrucción de la superconductividad por campos magnéticos

Cuando se aplica un gran campo magnético que supere cierto valor crítico, por lo cual lo denominamos campo magnético crítico H_c , este puede penetrar toda la muestra y además provoca la desaparición de la superconductividad. Si la superconductividad es abruptamente destruida cuando el campo aplicado supera un valor crítico H_c , pertenece al grupo denominado Tipo *I* de superconductores; mientras que si se obtiene una región intermedia en la cual el efecto Meissner no se cumple, pero tampoco desaparece abruptamente, el material pertenece al grupo denominado Tipo *II* de superconductores. En este grupo, es posible identificar dos valores críticos: H_{c1} y H_{c2} .

Al aumentar el campo magnético en un superconductores tipo *II* se distinguen tres regiones. La primera es cuando el campo es menor a H_{c1} (en donde el comportamiento es el explicado anteriormente debido al efecto Meissner), cuando el campo está entre los valores críticos H_{c1} y H_{c2} . En esta región, el comportamiento diamagnético no es uniformes en todo el material, por lo que éste tendrá algunos sectores superconductores y otros que no lo serán. Suele llamarse a ésta fase como zona de vórtices debido a que al penetrar líneas de campo y atravesar el material por sectores normales (no superconductores), se inducirán alrededor de éstos circulaciones o vórtices de corrientes superconductoras. Y por último tenemos cuando el campo es mayor que H_{c2} (en donde desaparece todo efecto superconductor).

Fundamentos básicos

Modelo inicial para metales

En los metales los electrones que participan en la conducción se denominan electrones de conducción. Están orbitando en la parte más externa alrededor del núcleo atómico. Los electrones que están más cerca del núcleo forman parte de los iones metálicos. En los metales cristalinos, estos iones forman un arreglo prácticamente en reposo con espaciamiento regular llamado red.

Entonces un metal puede verse como un sistema de dos componentes: Electrones móviles y una red de iones relativamente en reposo.

Oscilador armónico simple y energía de punto cero

El hamiltoniano H para un oscilador armónico simple está dado por:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \quad (2.2)$$

Sus autovalores de energía están dados por:

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.3)$$

Por lo tanto la energía de punto cero E_0 es:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega_0 \quad (2.4)$$

El estado más estable para un sistema cuántico no es el estado de equilibrio donde el potencial de energía es el más bajo. El mínimo de energía de equilibrio dinámico está caracterizado por energía cinética y potencial. El movimiento de átomos ligeros en el punto cero evita la solidificación.

Energía de punto cero para la red cristalina

A $0K$ los iones no se encontrarán en reposo debido a que se violaría el principio de incerteza de Heisenberg al tener la posición de los mismos y sus momentos definidos, debido a esto, los iones se encontrarán oscilando alrededor de su punto de equilibrio con energía de punto cero. Sin embargo debido a la gran cantidad de iones que puede tener una muestra, podemos hacer uso de la estadística cuántica, la cual predice que en promedio los iones se encuentran en ciertas posiciones en reposo en la red. Teniendo esto en mente podemos pensar que a $0K$ los iones se encontrarán en reposo en ciertas posiciones conformando la red cristalina. Vistos de esta forma, cada ion genera campos eléctricos, dotando a la red de un potencial periódico.

Por lo tanto el hamiltoniano H_0 del modelo inicial para la red cristalina a $0K$ es:

$$H_0 = H_i + H_{ei} + H_e \quad (2.5)$$

donde H_i es el hamiltoniano de los iones, H_{ei} es el hamiltoniano de interacción de electrones con iones y H_e es el hamiltoniano de los electrones.

Vibraciones de red, los fonones

Cuando la red absorbe calor del medio ambiente circundante, esta energía adquirida es tomada por los iones, por la cual los mismos oscilarán alrededor de su punto de equilibrio. Al oscilar estas partículas generan ondas electromagnéticas, estas propagan vibraciones por toda la red. De tal forma que podemos identificar dos tipos de oscilaciones: las oscilaciones individuales de cada ion y las oscilaciones de red. Las oscilaciones de los iones individuales, considerados como osciladores armónicos, tienen cuantizada su energía. A estos cuantos energéticos se los denomina fonones individuales. En las oscilaciones de red podemos seguir el principio de superposición de Fourier para considerarlas como la mezcla de oscilaciones sinusoidales, las cuales dentro de cierta región cúbica de longitud L poseen diferentes modos de vibración por lo cual podemos hablar de ellos como cuantos energéticos denominados

fonones de red o simplemente fonones. Haciendo uso de la dualidad onda-partícula podemos pensar en los fonones como partículas.

El hamiltoniano H del modelo inicial para metales a temperatura superior a $0K$ es:

$$H = H_p + H_{eio} + H_{ep} + H_e \quad (2.6)$$

Si comparamos esta ecuación con (2.5), se observa que, debido al incremento de energía, H_i se ha transformado en un hamiltoniano de fonones H_p y el hamiltoniano H_{ei} se ha transformado en $H_{eio} + H_{ep}$, cuya demostración matemática se da en la sección 3.5, en donde H_{eio} hace referencia a un hamiltoniano de interacción de electrones con iones en reposo y H_{ep} es el hamiltoniano de interacción de electrones con fonones.

Modelo del liquido de Fermi para metales, electrones de Bloch

El campo periódico de la red frena el tránsito de los electrones libres. En otras palabras el efecto del campo sobre los electrones es dotarlos de una inercia (masa) adicional. Los electrones con esta masa efectiva se denominan Electrones de Bloch.

Por lo tanto el hamiltoniano equivalente de los electrones H_{eb} de Bloch es:

$$H_{eb} = H_{eio} + H_{ee} \quad (2.7)$$

En consecuencia

$$H = H_p + H_{ep} + H_e \quad (2.8)$$

Entonces de acuerdo a esto, junto con el principio de exclusión de Paulli, que aplica a electrones donde no se considera la interacción, obtenemos el modelo del líquido de Fermi. En este modelo el estado cuántico para el electrón de Bloch está

caracterizado por un vector \hat{k} , número de zona j , y la energía:

$$E = E_j(\hat{k}) \quad (2.9)$$

A cero grados Kelvin todos los estados de energía más bajos están llenos con electrones, y existe una superficie de Fermi representada por:

$$E_j(\hat{k}) = E_F \quad (2.10)$$

Donde E_F se denomina energía de Fermi.

Para una descripción mas detallada debemos consultar [Kietel]

Origen de la resistencia eléctrica y la superconductividad

Cuando en un metal la temperatura es relativamente alta, empezará a absorber calor para generar gran cantidad de fonones. Estos impedirán el transito de los electrones al suministrar un campo eléctrico a la muestra, generando resistencia eléctrica.

Al bajar la temperatura, bajo cierta temperatura crítica T_c , la cantidad de fonones a disminuido, y las vibraciones de red se suavizarán, de tal forma que los electrones pueden “bailar al compás de estas nuevas ondas”, acoplándolos estadísticamente por pares. Estos pares llamados de Cooper, son bosones y conforman un condensado de Bose-Einstein y son los responsables de la superconductividad que entre sus características está la generación de corrientes sin resistencia. Como puede apreciarse los fonones son los responsables de la resistencia eléctrica a altas temperaturas, pero también son los responsables de suprimirla a temperaturas inferiores a T_c , cuando estos generan los Pares de Cooper. responsables de la superconductividad.

Para una descripción más detallada de la dinámica de la superconductividad debemos partir del hamiltoniano que incluye a los electrones de Bloch y los fonones, y luego de postular ciertas consideraciones para obtener un hamiltoniano equivalente

donde se tenga en cuenta las interacciones de los Pares de Cooper. Este programa es el que precisamente siguieron, Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS), dando con la teoría más exacta obtenida hasta el momento para explicar el fenómeno superconductor. En el siguiente capítulo exploremos apartes de esta teoría.

Capítulo 3

Teoría BCS

Introducción

En 1957 Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) publicaron el primer trabajo sobre la teoría microscópica de la superconductividad la cual se fundamenta en la mecánica cuántica. Se ha reconocido que esta teoría es correcta en todos los aspectos esenciales y explica un número importante de fenómenos a nivel experimental. En 1972 les fue otorgado el Premio Nobel de Física a los creadores de esta teoría.

La forma de explicar la superconductividad a nivel fundamental es considerar que se debe a la existencia de un condensado de Bose-Einstein (BE) de los portadores de carga, sin embargo los electrones son fermiones y no tienen esta propiedad [1]. Bardeen y Schrieffer vieron la solución a este problema al considerar que los electrones se acoplan en pares mediante fonones. Para justificar esto el hamiltoniano de partida que considera las interacciones de electrones y fonones debe sufrir ciertos cambios enmarcados en la mecánica cuántica de tal forma que obtengamos un hamiltoniano que incluya a los Pares de Cooper. Esta serie de cambios son la columna vertebral de la teoría BCS.

A continuación se desarrollan algunos conceptos claves que serán utilizados para entender la teoría BCS.

Conceptos Importantes

Operador permutación

Sea un sistema de dos partículas y dos posibles estados: $|K'\rangle$ y $|K''\rangle$.

El estado mezcla $|K'\rangle|K''\rangle$ indica que la primer partícula está en el estado $|K'\rangle$ y la segunda partícula en el estado $|K''\rangle$.

En general $|K'\rangle|K''\rangle \neq |K''\rangle|K'\rangle$.

Ahora definamos el operador permutación P_{12} , que intercambia el estado de las partículas así:

$$P_{12}|K'\rangle|K''\rangle = |K''\rangle|K'\rangle \quad (3.1)$$

Este operador tiene las siguientes propiedades:

$$P_{12} = P_{21} \text{ y } P_{12}^2 = 1$$

Si el operador permutación se aplica a un sistema de N partículas, cumplirá las siguientes reglas:

$$P_{ij}|NBosones\rangle = +|NBosones\rangle \quad (3.2)$$

$$P_{ij}|NFermiones\rangle = -|NFermiones\rangle \quad (3.3)$$

Estados multi-partícula y el espacio de Fock

El estado de varias partículas está descrito por el espacio de Fock dado por:

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (3.4)$$

Donde n_i es el número de ocupación o el número de partículas en el estado i .

El estado en el cual no existe partículas en cada uno de los estados constituyentes se denomina estado vacío:

$$|0, 0, 0, 0, \dots\rangle \equiv |0\rangle \quad (3.5)$$

Si una partícula está en el estado i y el resto de estados están vacíos a este estado lo denotamos con $|K_i\rangle$:

$$|0, 0, 0, 0, \dots, n_i = 1, 0, 0, \dots\rangle = |K_i\rangle \quad (3.6)$$

Operadores de creación y aniquilación

El operador de creación a_i^\dagger (aniquilación a_i) cuando se aplica al estado de Fock, crea (destruye) una partícula en el estado i [2]:

$$a_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (3.7)$$

$$a_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (3.8)$$

Para un sistema de dos partículas, la diferencia entre bosones y fermiones esta dada por:

$$|K_i, K_j\rangle = \pm |K_j, K_i\rangle \quad (3.9)$$

Donde + es para bosones y – para fermiones.

Por lo tanto si aplicamos $a_i^\dagger a_j^\dagger$ al estado vacío de un sistema de dos partículas, tenemos:

$$a_i^\dagger a_j^\dagger |0\rangle = \pm |K_j, K_i\rangle \quad (3.10)$$

Relaciones de conmutación y anticonmutación

Para Bosones

Aplicemos el operador de permutación $[a_i^\dagger, a_j^\dagger]$ al estado vacío de dos partículas:

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] |0\rangle = [|K_i, K_j\rangle - |K_j, K_i\rangle] = 0 \quad (3.11)$$

Por lo tanto:

$$[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad (3.12)$$

De forma similar tenemos:

$$[a_i, a_j] = 0 \quad [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \quad (3.13)$$

Para Fermiones

Para fermiones se cumplen las siguientes relaciones:

$$\{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \quad \{a_i, a_j\} = 0 \quad \{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (3.14)$$

Segunda cuantización de variables dinámicas

Sea $|k_i\rangle$ el auto-estado del operador \hat{k}_i de una simple partícula.

En algún estado multi-partícula $|\Psi\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$, el autovalor del operador \hat{k} viene dado porque $\sum_i n_i k_i$. Por lo tanto:

$$\hat{k} = \sum_i \hat{k}_i \hat{N}_i = \sum_i \hat{k}_i a_i^\dagger a_i \quad (3.15)$$

El cambio de base de $|k_i\rangle$ está dado por:

$$|k_i\rangle = \sum_j |l_j\rangle \langle l_j | k_i \rangle \quad (3.16)$$

Entonces tiene sentido postular la siguiente igualdad:

$$a_i^\dagger = \sum_j b_j^\dagger \langle l_j | k_i \rangle \quad (3.17)$$

Donde b_j^\dagger es el operador de creación de una partícula en el estado $|l_j\rangle$.

De acuerdo a lo anterior podemos expresar $\hat{\kappa}$ de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 \hat{\kappa} &= \sum_i k_i \sum_{mn} b_m^\dagger \langle l_m | k_i \rangle \langle k_i | l_n \rangle b_n \\
 &= \sum_{mn} b_m^\dagger b_n \sum_i \langle l_m | k_i \rangle k_i \langle k_i | l_n \rangle \\
 &= \sum_{mn} b_m^\dagger b_n \langle l_m | \hat{\kappa} [\sum_i |k_i\rangle \langle k_i|] | l_n \rangle \\
 &= \sum_{mn} b_m^\dagger b_n \langle l_m | \hat{\kappa} | l_n \rangle
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Consideremos ahora un sistema de dos partículas interactuando (interacción por pares para el sistema). Sea V_{ij} el autovalor que especifica la interacción de dos partículas simples en los estados $\langle k_i |$ y $\langle k_j |$. El autovalor correspondiente \hat{V} , viene dado por:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{ij} \hat{N}_i \hat{N}_j + \frac{1}{2} \sum_i \hat{V}_{ii} \hat{N}_i (N_i - 1) \tag{3.19}$$

El primer término contiene todas las interacciones de dos partículas. el segundo término contiene todas las auto-interacciones para partículas en el mismo estado.

Existen $n(n-1)/2$ formas de tomar n objetos de dos en dos, por lo tanto podemos escribir:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{ij} (\hat{N}_i \hat{N}_j - \hat{N}_i \delta_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{ij} \hat{V}_{ij} \hat{\Pi}_{ij} \tag{3.20}$$

Donde $\hat{\Pi}_{ij} = \hat{N}_i \hat{N}_j - \hat{N}_i \delta_{ij}$ puede desarrollarse de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 \hat{\Pi}_{ij} &= a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - a_i^\dagger a_i \delta_{ij} \\
 &= a_i^\dagger (\delta_{ij} + a_j^\dagger a_j) a_j - a_i^\dagger a_i \delta_{ij} \\
 &= +a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

En consecuencia:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{ij} \hat{V}_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i \quad (3.22)$$

También podemos escribir:

De forma similar el operador de energía cinética total \hat{T} viene dado por:

$$\hat{T} = \sum_{ij} T_{ij} a_i^\dagger a_j \quad (3.23)$$

donde $T_{ij} = \langle i | \hat{T} | j \rangle$

Fonones de red

Sea u_x el desplazamiento de un elemento de volumen desde su posición de equilibrio hasta una posición x en el cristal. En un estudio bien detallado de una red mono-atómica se puede establecer el comportamiento del modo de onda transversal elástica u_x [3] de acuerdo a:

$$u_x = u_0 \cos(K_x x) \cos(\omega t) \quad (3.24)$$

Donde u_0 es la amplitud y K_x es la componente del vector de onda en la dirección X . La energía de cada modo de onda está dada por:

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (3.25)$$

(Fujita 58)

La onda anterior responde a la siguiente ecuación de movimiento:

$$\rho \frac{\partial^2 \vec{U}}{\partial t^2} = S \nabla^2 \vec{U} \quad (3.26)$$

Donde \vec{U} es el desplazamiento transversal, ρ y S son, respectivamente la densidad de masa volumétrica y el módulo elástico.

La densidad lagrangiana \mathcal{L} es:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}\left(u_x, u_y, u_z, \frac{\partial u_x}{\partial t}, \frac{\partial u_y}{\partial t}, \frac{\partial u_z}{\partial t}, \dots\right) \quad (3.27)$$

Las ecuaciones de movimiento están dadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial u_a / \partial t)} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial u_a / \partial x)} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial u_a / \partial y)} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial u_a / \partial z)} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_a} = 0 \quad (3.28)$$

con $a = x, y, z$.

En nuestro caso escogemos:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\rho \left| \frac{\partial \vec{U}}{\partial t} \right|^2 - \frac{1}{2}S \left(\left| \frac{\partial \vec{U}}{\partial x} \right|^2 + \left| \frac{\partial \vec{U}}{\partial y} \right|^2 + \left| \frac{\partial \vec{U}}{\partial z} \right|^2 \right) - \frac{1}{2}\rho \left(\left| \frac{\partial u_x}{\partial t} \right|^2 + \left| \frac{\partial u_y}{\partial t} \right|^2 + \left| \frac{\partial u_z}{\partial t} \right|^2 \right) - \dots \quad (3.29)$$

De tal forma que al utilizar (3.28) y (3.29) podemos verificar la ecuación (3.26).

El hamiltoniano para los fonones de red

Teniendo en cuenta una caja cúbica de longitud L_0 podemos introducir las coordenadas normales:

$$q_{\vec{k},\sigma}(t) = \left(\frac{2}{L_0}\right)^3 \int_0^{L_0} dx \int_0^{L_0} dy \int_0^{L_0} dz u_{\sigma} \text{sen}(xK_x) \text{sen}(yK_y) \text{sen}(zK_z) \quad (3.30)$$

donde $\sigma = 1, 2$, es llamado índice de polarización.

Con estas coordenadas \mathcal{L} queda de la forma:

$$\sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \left[\frac{1}{4} \rho \dot{q}_{\vec{k},\sigma}^2 - \frac{1}{4} S K^2 q_{\vec{k},\sigma}^2 \right] \quad (3.31)$$

El lagrangiano L es definido a partir de la densidad lagrangiana \mathcal{L} cuando consideramos un volumen V como sigue:

$$L = V \mathcal{L} \quad (3.32)$$

Por conveniencia posterior se introducen nuevas coordenadas normales:

$$Q_{\vec{k},\sigma} = \left(\frac{V\rho}{2}\right)^{1/2} q_{\vec{k},\sigma} \quad (3.33)$$

con estas coordenadas el lagrangiano queda expresado así:

$$L = \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \frac{1}{2} \left[\dot{Q}_{\vec{k},\sigma}^2 - \omega_{t,K}^2 Q_{\vec{k},\sigma}^2 \right] \quad (3.34)$$

Por lo tanto el momento canónico $P_{\vec{k},\sigma}$ puede ser deducido de acuerdo a:

$$P_{\vec{k},\sigma} = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_{\vec{k},\sigma}} = \dot{Q}_{\vec{k},\sigma} \quad (3.35)$$

El hamiltoniano H_t para la onda transversal puede ser construido por la expresión $\sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} P_{\vec{k},\sigma} \dot{Q}_{\vec{k},\sigma} - L$ en términos de $Q_{\vec{k},\sigma}, P_{\vec{k},\sigma}$. El resultado está dado por:

$$H_t = \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma} \frac{1}{2} \left[P_{\vec{k},\sigma}^2 + \omega_{t,K}^2 Q_{\vec{k},\sigma}^2 \right] \quad (3.36)$$

Ahora se pueden definir el operador de creación de fonones b^\dagger y el de aniquilación de fonones b así:

$$b^\dagger = (2\hbar\omega)^{-1/2}(\omega Q - iP) \quad (3.37)$$

$$b = (2\hbar\omega)^{-1/2}(\omega Q + iP) \quad (3.38)$$

En término de estos operadores H_t toma la forma:

$$H_t = \hbar\omega \left(b^\dagger b + \frac{1}{2} \right) \quad (3.39)$$

El hamiltoniano de interacción iones-electrones

La interacción los iones y los electrones puede ser descrita mediante el hamiltoniano

$$H_{ei} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_i} V_{ei}(\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha) \quad (3.40)$$

Donde \vec{r}_i hace referencia a la posición del electrón i y \vec{R}_α hace referencia a la posición del ion α fuera de posición de equilibrio. Estas medidas se realizan desde un punto de referencia ubicado en el punto de equilibrio de un ion de red.

Sea $\vec{R}_{o\alpha}$ la posición del ion α en su posición de equilibrio y sea \vec{u}_α el desplazamiento desde su posición de equilibrio. Entonces podemos obtener la siguiente relación:

$$\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha = \vec{r}_i - \vec{R}_{o\alpha} - \vec{u}_\alpha \quad (3.41)$$

Podemos expandir el potencial V_{ei} alrededor de $\vec{r}_i - \vec{R}_{o\alpha}$ así:

$$V_{ei}(\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha) = V_{ei}(\vec{r}_i - \vec{R}_{o\alpha}) - u \frac{\partial}{\partial r_i} V_{ei}(\vec{r}_i - \vec{R}_{o\alpha}) \quad (3.42)$$

Entonces H_{ei} puede ser escrito como:

$$H_{ei} = H_{oei} - H_{ep} \quad (3.43)$$

$H_{oei} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_i} V_{ei}(\vec{r}_i - \vec{R}_{o\alpha})$ es el hamiltoniano de la red con iones estáticos en su posición de equilibrio interactuando con los electrones. El resultado de esta interacción los electrones adquieren una masa adicional. Los electrones con masa efectiva dada por la red se denominan electrones de Bloch.

$H_{ep} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_i} \vec{u}_\alpha \cdot \nabla V_{ei}(\vec{r}_i - \vec{R}_{o\alpha})$ se denomina hamiltoniano de interacción de los electrones con los fonones. A continuación analizaremos este hamiltoniano el cual nos conducirá a establecer los Pares de Cooper.

Hamiltoniano de interacción electrones-fonones

Existe una relación entre u y las coordenadas normales Q dada por la transformada de Fourier:

$$\vec{u}_j(\vec{R}, t) = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_K \vec{Q}(\vec{R}, t) \epsilon_j(\vec{K}) \exp(i\vec{K} \cdot \vec{R}) \quad (3.44)$$

y su inversa:

$$\vec{Q}(\vec{R}, t) = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_j \vec{u}_j(\vec{R}, t) \epsilon_j(\vec{K}) \exp(-i\vec{K} \cdot \vec{R}) \quad (3.45)$$

Donde N es el número total de iones de la muestra, M es la masa de la muestra, ϵ_j es la energía del ion j .

De igual forma la transformada de Fourier para V_{ei} es:

$$V_{ei}(\vec{r}_j - \vec{R}_{\alpha}) = \sum_{\vec{K}_2} V'_{ei}(\vec{K}_2) \exp(i\vec{K}_2(\vec{r}_j - \vec{R}_{\alpha})) \quad (3.46)$$

Por lo tanto tenemos:

$$\nabla V_{ei}(\vec{r}_j - \vec{R}_{\alpha}) = i \sum_{\vec{K}_2} V'_{ei}(\vec{K}_2) \vec{K}_2 \exp(i\vec{K}_2(\vec{r}_j - \vec{R}_{\alpha})) \quad (3.47)$$

Expresemos $\nabla V_{ei}(\vec{r}_j - \vec{R}_{\alpha})$ en segunda cuantización:

$$\begin{aligned} \nabla V_{ei}(\vec{r}_j - \vec{R}_{\alpha}) &= \sum_{K, K', \sigma, \sigma'} \langle \vec{K} \sigma | \nabla V_{ei} | \vec{K}' \sigma' \rangle a_{\vec{K} \sigma}^{\dagger} a_{\vec{K}' \sigma'} \\ &= \sum_{K, K', \sigma, \sigma'} \sum_{\vec{K}_2} V'_{ei}(\vec{K}_2) \vec{K}_2 \exp(i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_j) \langle \vec{K} \sigma | \exp(i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_j) | \vec{K}' \sigma' \rangle a_{\vec{K} \sigma}^{\dagger} a_{\vec{K}' \sigma'} \end{aligned} \quad (3.48)$$

$$\begin{aligned}
\langle \vec{K} \sigma | \exp(i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_j) | \vec{K}' \sigma' \rangle &= \sum_{\sigma'} \langle \vec{K} | \langle \sigma | \sigma' \rangle | \sigma' \rangle \langle \sigma' | \exp(i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_j) | \vec{K}' \sigma' \rangle \\
&= \sum_{\sigma} \delta_{\sigma\sigma'} \langle \vec{K} \sigma | \exp(i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_j) | \vec{K}' \sigma' \rangle \\
&= \sum_{\sigma} \delta_{\sigma\sigma'} \langle \vec{K} | \exp(i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_j) | \vec{K}' \rangle \\
&= \delta_{\sigma\sigma'} \int d^3 r_j \langle \vec{K} | \exp(i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_j) | \vec{r}_j \rangle \langle \vec{r}_j | \vec{K}' \rangle \\
&= \delta_{\sigma\sigma'} \int d^3 r_j \exp(i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_j) \langle \vec{K} | \vec{r}_j \rangle \langle \vec{r}_j | \vec{K}' \rangle \\
&= \int d^3 r_j \exp(i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_j) \Psi_{\vec{K}}^*(\vec{r}_j) \Psi_{\vec{K}'}(\vec{r}_j)
\end{aligned} \tag{3.49}$$

$\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}_j)$ es la función de onda de un electrón de Bloch, denominada función de Bloch. Esta función se expresa de la siguiente forma:

$$\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}_j) = v_{\vec{K}}(\vec{r}_j) \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_j) \tag{3.50}$$

donde $v_{\vec{K}}(\vec{r}_j)$ es función de amplitud.

Por lo tanto:

$$\langle \vec{K} \sigma | \exp(i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_j) | \vec{K}' \sigma' \rangle = \int d^3 r_j \exp(i(\vec{K}_2 - \vec{K} + \vec{K}') \cdot \vec{r}_j) v_{\vec{K}}^*(\vec{r}_j) v_{\vec{K}'}(\vec{r}_j) \tag{3.51}$$

La identidad (3.48) toma la forma:

$$\begin{aligned}
\nabla V_{ei}(\vec{r}_j - \vec{R}_{\alpha}) &= \\
\sum_{K, K'} \sum_{\vec{K}_2} V'_{ei}(\vec{K}_2) \exp(-i(\vec{K}_2 \cdot \vec{R}_{\alpha})) a_{\vec{K}_2 \sigma}^{\dagger} a_{\vec{K}' \sigma'} &\int d^3 r_j \exp(i(\vec{K}_2 - \vec{K} + \vec{K}') \cdot \vec{r}_j) v_{\vec{K}}^*(\vec{r}_j) v_{\vec{K}'}(\vec{r}_j)
\end{aligned} \tag{3.52}$$

De tal forma que H_{ep} toma la expresión:

$$\begin{aligned}
 H_{ep} &= i \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{j=1}^N \sum_{\vec{K}_1} \vec{Q}(\vec{R}, t) \epsilon_j(\vec{K}_1) \exp(i\vec{K}_1 \cdot \vec{R}_{0\alpha}) \nabla V_{ei}(\vec{r}_j - \vec{R}_{0\alpha}) \\
 &= i \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{j=1}^N \sum_{\vec{K}_1, \vec{K}_2, \vec{K}, \vec{K}'} \vec{Q}(\vec{R}, t) \epsilon_j(\vec{K}_1) \exp(i\vec{K}_1 \cdot \vec{R}_{0\alpha}) V'_{ei}(\vec{K}_2) \vec{K}_2 \exp(-i(\vec{K}_2 \cdot \vec{R}_{0\alpha})) a_{\vec{K}\sigma}^\dagger a_{\vec{K}'\sigma'} \\
 &\quad \int d^3 r_j \exp(i(\vec{K}_2 - \vec{K} + \vec{K}') \cdot \vec{r}_j) v_{\vec{K}}^*(\vec{r}_j) v_{\vec{K}'}(\vec{r}_j)
 \end{aligned} \tag{3.53}$$

Teniendo en cuenta que $\frac{1}{N} \exp(i(\vec{K}_1 - \vec{K}_2) \cdot \vec{R}_{0\alpha}) = \sum_{\vec{G}} \delta_{\vec{K}_2, \vec{K}_1 + \vec{G}}$ donde \vec{G} se denomina vector principal de la red recíproca. La relación anterior toma la forma:

$$\begin{aligned}
 H_{ep} &= i \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{j=1}^N \sum_{\vec{K}_1, \vec{K}, \vec{K}', \vec{G}} \vec{Q}(\vec{R}, t) \epsilon_j(\vec{K}_1) V'_{ei}(\vec{K}_2) \vec{K}_2 N \delta_{\vec{K}_2, \vec{K}_1 + \vec{G}} a_{\vec{K}\sigma}^\dagger a_{\vec{K}'\sigma'} \\
 &\quad \int d^3 r_j \exp(i(\vec{K}_2 - \vec{K} + \vec{K}') \cdot \vec{r}_j) v_{\vec{K}}^*(\vec{r}_j) v_{\vec{K}'}(\vec{r}_j) \\
 &= i \frac{N}{\sqrt{M}} \sum_{j=1}^N \sum_{\vec{K}_1, \vec{K}_2, \vec{K}, \vec{K}', \vec{G}} \vec{Q}(\vec{R}, t) \epsilon_j(\vec{K}_1) V'_{ei}(\vec{K}_1 + \vec{G}) (\vec{K}_1 + \vec{G}) a_{\vec{K}\sigma}^\dagger a_{\vec{K}'\sigma'} \\
 &\quad \int d^3 r_j \exp(i(\vec{K}_1 + \vec{G} - \vec{K} + \vec{K}') \cdot \vec{r}_j) v_{\vec{K}}^*(\vec{r}_j) v_{\vec{K}'}(\vec{r}_j)
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

Sabiendo que $Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}(b + b^\dagger)$:

$$H_{ep} = \sum_{j, \vec{K}, \vec{K}', \vec{K}_1, \vec{G}} T_{j, \vec{K}, \vec{K}', \vec{K}_1, \vec{G}}^j (b_{\vec{K}_1} + b_{\vec{K}_1}^\dagger) a_{\vec{K}\sigma}^\dagger a_{\vec{K}'\sigma'} \tag{3.55}$$

Donde el potencial de interacción de electrones y fonones $T_{j, \vec{K}, \vec{K}', \vec{K}_1, \vec{G}}$ viene dado por:

$$T_{j, \vec{K}, \vec{K}', \vec{K}_1, \vec{G}} = -i \sqrt{\frac{\hbar N}{2M\omega(\vec{K}_1)}} \epsilon_j(\vec{K}_1) V'_{ei}(\vec{K}_1 + \vec{G}) (\vec{K}_1 + \vec{G}) \int d^3 r_j \exp(i(\vec{K}_1 + \vec{G} - \vec{K} + \vec{K}') \cdot \vec{r}_j) v_{\vec{K}}^*(\vec{r}_j) v_{\vec{K}'}(\vec{r}_j) \tag{3.56}$$

Pares de Cooper

El hamiltoniano que describe la dinámica de la red cristalina es:

$$H = \sum_{K\sigma} \epsilon(K) a_{K\sigma}^\dagger a_{K\sigma} + \sum_{K_1} \hbar\omega(K_1) b_{K_1}^\dagger b_{K_1} + \sum_{j,K,K',K_1,G} T_{j,K,K',K_1,G}^j (b_{K_1} + b_{K_1}^\dagger) a_{\vec{K}\sigma}^\dagger a_{\vec{K}'\sigma'} \quad (3.57)$$

El primer término hace referencia a la dinámica de los electrones de Bloch, el segundo término hace referencia a la dinámica de los fonones y el tercer término hace referencia a la interacción de electrones y fonones. Mediante ciertas transformaciones canónicas podemos obtener el potencial $V_K(K_1)$ de interacción de un electrón con vector de onda K mediados por un fonon de vector de onda K_1 :

$$V_K(K_1) = |T_{K_1}| \frac{\hbar\omega(K_1)}{(\epsilon(K + K_1) - \epsilon(K))^2 - (\hbar\omega(K_1))^2} \quad (3.58)$$

Bajo estas premisas y bajo ciertas manipulaciones matemáticas que no se expondrán aquí el hamiltoniano de los electrones de la red cristalina se reduce a:

$$H = \sum_{K\sigma} \epsilon(K) a_{K\sigma}^\dagger a_{K\sigma} + \sum_{KK_1\sigma} V_K(K_1) a_{\vec{K}+K_1\sigma}^\dagger a_{\vec{K}'-K_1(-\sigma)}^\dagger a_{K'\sigma'} a_{K\sigma} \quad (3.59)$$

Donde el primer término hace referencia a los electrones libres y el segundo término hace referencia a la interacción de electrones mediada por fonones.

El problema de Cooper

Cooper postuló el siguiente problema:

1. Consideremos N electrones libres tal que sus estados sean $K \ll K_F$, esto es la esfera de Fermi. Todos los estados $K > K_F$ están desdoblados.
2. Se adicionan dos electrones por encima de la esfera de Fermi con vectores de onda opuestos y espines opuestos y que interactúan de acuerdo al potencial

$V_K(K_1)$ que es $-V$ si $|\epsilon(\vec{K} + \vec{K}_1) - E(K)| \ll \hbar\omega_D$ y 0 para otros casos. ω_D es la frecuencia de Debye.

El estado de un par de Cooper se define por $|K \uparrow, -K \downarrow\rangle$. El operador de creación de Pares de Cooper d_K^\dagger se define así:

$$d_K^\dagger = a_{K\uparrow}^\dagger a_{-K\downarrow}^\dagger \quad (3.60)$$

y el de aniquilación d_K

$$d_K = a_{-K\downarrow} a_{K\uparrow} \quad (3.61)$$

Por lo tanto se pueden verificar las siguientes relaciones que resultan de aplicar sobre un estado vacío de un par de Cooper:

$$[d_K, d_{K'}^\dagger] = 0 \quad (3.62)$$

$$[d_K^\dagger, d_{K'}^\dagger] = 0 \quad (3.63)$$

$$[d_K, d_{K'}^\dagger] = \delta_{KK'}(1 - N_{K\downarrow} - N_{K\uparrow}) \quad (3.64)$$

$$(d_K)^2 = (d_K^\dagger)^2 \quad (3.65)$$

$$\{d_K, d_{K'}^\dagger\} = 2d_K d_{K'}^\dagger \quad (3.66)$$

Por lo tanto los Pares de Cooper no son genuinamente bosones ni fermiones. Sin embargo debido a que estas partículas tienen espín cero, estadísticamente se comportan como bosones con pequeñas perturbaciones que pueden ser despreciadas.

El hamiltoniano de la expresión (3.59) enmarcado en el problema de Cooper es:

$$H = \sum_{K\sigma} \epsilon(K) a_{K\sigma}^\dagger a_{K\sigma} - \frac{1}{2} V \sum_{KK's} a_{K's}^\dagger a_{-K's}^\dagger a_{-Ks} a_{Ks} \quad (3.67)$$

s y \bar{s} hacen referencia al espín.

Capítulo 4

Teoría de Ginzburg-Landau

Introducción

En el capítulo anterior se ha expuesto la teoría BCS sobre superconductividad, esta teoría desde su punto de vista microscópico nos permite deducir las propiedades de la superconductividad las cuales son evidentes experimentalmente. Sin embargo esta teoría no es muy práctica a la hora de enfrentarnos a problemas muy específicos en donde se traten muestras que adopten diferentes tipos de simetría. La teoría usual que maneja este tipo de problemas se denomina teoría de Ginzburg-Landau y su desarrollo se presentó anterior a la teoría BCS.

Rompimiento de simetría

La teoría de Ginzburg-Landau es una teoría de campos la cual nace del estudio de los rompimientos de simetría en materia condensada. En física, se habla de simetría cuando bajo ciertas transformaciones los aspectos de los sistemas físicos no cambian, de acuerdo a una observación particular. La simetría de un sistema físico se presenta cuando una propiedad (observable o intrínseca) del mismo es preservada bajo un cambio o transformación. Las simetrías pueden ser clasificadas en locales y globales. Las simetrías globales involucran a todos los puntos del espacio-tiempo, mientras que las locales solo a algunas regiones.

El efecto Meissner sucede cuando un campo magnético estático penetra en el superconductor induciendo un flujo de corriente de los Pares de Cooper. Esta corriente inducida genera un campo magnético que cancela al interior el campo magnético

externo, no completamente puesto que el campo alcanza a penetrar una pequeña distancia denominada longitud de London. La fase superconductor en interacción con un campo magnético puede ser estudiada por el hamiltoniano correspondiente y las ecuaciones de Maxwell que manifiestan in-varianza gauge $U(1)$. El efecto Meisner resulta porque dentro del superconductor se rompe la in-varianza gauge $U(1)$ del electromagnetismo.

Como sucede en muchos fenómenos donde aparece el rompimiento de simetría, cierta partículas adquieren masa. En nuestro caso las partículas que adquieren masa son los fotones que se apliquen al material.

Entonces la superconductividad puede entenderse como el resultado de rompimiento de simetría. Podemos comparar este fenómeno con el mecanismo de Higgs en el cual el rompimiento ocurre por la existencia de un campo denominado campo de Higgs constituido por los bosones de Higgs, en superconductividad tenemos un campo compuesto por los bosones denominados Pares de Cooper. Debido a la interacción de los bosones de Higgs con las partículas del universo estas pueden adquirir masa. De forma similar los fotones dentro de un superconductor al interactuar con los Pares de Cooper pueden adquirir masa, esta resistencia es la que causa que los campos magnéticos del efecto Meisner no penetren al interior de la muestra superconductor.

Cambios de fase de segunda especie

La teoría de Ginzburg-Landau es una teoría de campos la cual nace del estudio de los rompimientos de simetría en materia condensada [4]. En el caso particular de la superconductividad pequeños campos magnéticos $B < B_c$ pueden penetrar totalmente el material para $T > T_c$, pero cuando la temperatura supera T_c , se rompe la simetría, expulsando el campo magnético del interior del material (el campo magnético adquiere cierta resistencia a permanecer dentro del material). A continuación solo se trataran los temas más relevantes de la teoría de Ginzburg-Landau, para un

estudio mas enfocado desde la teoría de campos se sugiere estudiar el trabajo de Alexander T. Kieft⁴.

El grado de simetría puede ser medido mediante el parámetro Ψ , denominado parámetro de orden (Este nombre viene del hecho de que al considerar cristales, el grado de simetría corresponde al grado de orden de los iones constituyentes de la red cristalina). Siendo $\Psi = 0$, para el grado de mayor simetría, correspondiente al estado no conductor para $T > T_c$ y Ψ diferente de cero para grados de menor simetría, correspondiente al estado superconductor para $T < T_c$.

La transición de conductor a superconductor de un material puede considerarse un cambio de fase de segunda especie en el sentido de que mientras el estado termodinámico del material cambia de forma continua, la simetría sufre un salto (rompimiento) en el punto de transición. . Cuando se consideran magnitudes termodinámicas para desviaciones de simetría (es decir con respecto a Ψ) podemos considerar el potencial termodinámico de energía libre F como función de la Presión P , la temperatura T y Ψ . P y T pueden darse arbitrariamente mientras que Ψ puede darse a partir de la condición de equilibrio térmico, es decir de la condición de que Φ sea mínimo para valores dados de P y T .

La continuidad de la variación del estado en un cambio de fase de segunda especie encuentra su expresión matemática en el hecho de que cerca al punto de transición la magnitud Ψ toma valores tan pequeños cuanto se quiera. Al considerar un entorno del punto de transición, desarrollaremos $F(P, T, \eta)$ en serie de potencias de Ψ :

$$F(P, T, \eta) = F_0 + a_1\Psi + A\Psi^2 + B\Psi^3 + C\Psi^4 \quad (4.1)$$

Donde los coeficientes a_1, A, B y C, \dots , son funciones de P y T .

Si los estados con $\Psi = 0$ y $\Psi \neq 0$ difieren en su simetría, el término de primer orden se anula idénticamente: $a_1 = 0$. En cuanto al coeficiente $A(P, T)$ del término de segundo orden, debe anularse en el punto de transición. Se considera que cuando F sea mínimo, se ha alcanzado la fase simétrica. Cuando eso sucede $\Psi = 0$ y por lo tanto es necesario que $A(P, T) > 0$. En la parte no simétrica $\Psi \neq 0$; esto es posible si

se toma $A(P, T) < 0$. Por lo tanto siendo positivo a un lado del punto de transición y negativo al otro lado, A debe anularse en el punto de transición:

$$A_c(P, T) = 0 \quad (4.2)$$

donde el subíndice c caracteriza el punto de transición.

Pero hay que incluir que para que el punto de transición sea estable, es decir, para que F como función de Ψ tenga un mínimo (para $\Psi = 0$), es necesario que en este punto se anule también el término de tercer orden y el término de cuarto orden sea positivo:

$$A_c(P, T) = 0 \quad C_c(P, T) > 0 \quad (4.3)$$

De modo que el desarrollo del potencial termodinámico toma la forma:

$$F(P, T, \eta) = F_0 + A(P, T)\Psi^2 + C(P, T)\Psi^4 + \dots, \quad (4.4)$$

Los punto de transición se determinan por la ecuación $A(P, T) = 0$.

Si se considera la transición para un valor dado de la presión, cerca del punto de transición (cuya tempera es T_c) se puede escribir:

$$A(T) = a(T - T_c) \quad (4.5)$$

donde $a = \left. \frac{\partial A}{\partial T} \right|_{T=T_c}$ es una constante. En canto al coeficiente $C(T)$, podemos tomarlo igual, simplemente, a la constante $C(T_c)$.

La dependencia de Ψ respecto a la temperatura cerca del punto de transición en la fase no simétrica se determina a partir de la condición de que $F(\Psi)$ sea mínimo. Igualando a cero la derivada $\partial F/\partial \Psi$ se obtiene:

$$\Psi(A + 2C\Psi^2) = 0 \quad (4.6)$$

de donde

$$\Psi^2 = -\frac{A}{2C} = \frac{a}{2C}(T_c - T) \quad (4.7)$$

(la solución $\Psi = 0$ corresponde a la fase simétrica)

Determinamos ahora la entropía del cuerpo cerca del punto de transición. Prescindiendo de las potencias superiores a Ψ :

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = S_0 - \frac{\partial A}{\partial T}\Psi^2 \quad (4.8)$$

donde $S_0 = -\frac{\partial F_0}{\partial T}$ (el término con la derivada de Ψ con respecto a la temperatura desaparece en virtud de que $\partial F/\partial\Psi = 0$). De acuerdo a 4.7 para la parte no simétrica la entropía toma la forma:

$$S = S_0 + \frac{A}{2C} \frac{\partial A}{\partial T} = S_0 + \frac{a^2}{2C}(T - T_c) \quad (4.9)$$

En el propio punto de transición esta expresión se reduce a S_0 de forma que la entropía se conserva continua en dicho punto, como debía ser.

Finalmente determinamos la capacidad calorífica $C_p = T(\partial S/\partial T)_p$ de las dos fases en el punto de transición. Para la fase no simétrica, tenemos, derivando 4.9 :

$$C_p = C_{p0} + \frac{a^2 T_c}{2C} \quad (4.10)$$

Para la fase simétrica, en cambio, $S = S_0$ y, por consiguiente, $C_p = C_{p0}$. Entonces concluimos que el punto de cambio de simetría la capacidad calorífica experimenta un salto. El salto en la capacidad calorífica en el punto de transición es una de las principales características de la superconductividad observada experimentalmente.

La teoría termodinámica que se ha expuesto resuelve (con algunas reservas) la cuestión de la variación de las magnitudes termodinámicas en la transición de metal a superconductor del material.

Ahora bien de acuerdo a la teoría BCS los pares de Cooper que son los responsables de la superconductividad, no son bosones en el sentido que no siguen las reglas

de conmutación de los bosones, pero sin embargo tienen muchas propiedades a los mismos, por lo cual se los considera como pseudo-bosones. En base a esto podemos considerar a los pares de Cooper como bosones con un pequeño grado de perturbación. Bajo esta característica los pares de Cooper pueden originar condensados de Bose-Einstein (BE), eso significa que los pares de Cooper ocupan el mismo estado $\Psi(\vec{r})$ (La utilización de la misma letra que para el parametro de orden se aclara luego) en la fase superconductor.

La probabilidad de encontrar un par de Cooper en un determinado lugar es proporcional a $\Psi\Psi'$. Pero debido a que hay muchas partículas dentro de un volumen $dx dy dz$, el número de ellas es $\Psi\Psi' dx dy dz$. Ahora bien Ψ es la misma función de onda para cada una de la gran cantidad de partículas que están en el mismo estado, entonces $\Psi\Psi'$ puede interpretarse como densidad de carga eléctrica o densidad de partículas.

Existe un caso similar de condensación para los fotones. En donde la función de onda del sistema de fotones corresponde exactamente con el potencial vectorial A y la ecuación de Schrodinger es la misma ecuación de Maxwell. De forma similar, para el caso de la superconductividad la función de onda $\Psi(\vec{r})$ corresponde al parametro de orden.

Por lo tanto debe existir una ecuación de Schrodinger para el parametro de orden, que se deducirá a continuación.

Reescribiremos la ecuación 4.4 como:

$$F = F_0 + \alpha|\Psi^2| + \frac{1}{2}\beta|\Psi^4| \quad (4.11)$$

Ahora, para describir situaciones en las cuales la superconductividad no sea homogénea debemos generalizar la ecuación 4.11. Teniendo en cuenta que F se interpreta como una densidad de energía $f(\vec{r})$ se puede escribir:

$$F + F_0 + \int f(\vec{r})d^3r = F_0 + \int d^3r[\alpha|\Psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2}\beta|\Psi(\vec{r})|^4] \quad (4.12)$$

Donde, ahora F es la energía total libre. Para computar efectos del incremento de

la energía asociada con una distorsión espacial del parámetro de orden, es decir, el efecto asociado con una longitud de coherencia ξ ; Ginzburg y Landau sumaron un gradiente de energía de la forma:

$$F_G = \int \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Psi(\vec{r})|^2 d^3r \quad (4.13)$$

donde m es la masa del par de Cooper.

De esta forma la ecuación 4.12 toma la forma:

$$F = F_0 + \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\Psi(\vec{r})|^2 + \alpha |\Psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2} \beta |\Psi(\vec{r})|^4 \right] \quad (4.14)$$

Ahora si al material superconductor se le aplica un campo magnético, el término gradiente debe ser modificado con el fin de que sea invariante bajo una transformación gauge(local), de la forma:

$$\vec{P} \rightarrow \vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \quad \nabla \rightarrow \nabla - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \quad (4.15)$$

Las anteriores consideraciones, nos permiten expresar la energía libre (energía de Landau) en la forma:

$$F = F_0 + \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left| \nabla\Psi(\vec{r}) - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right|^2 + \alpha |\Psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2} \beta |\Psi(\vec{r})|^4 \right] \quad (4.16)$$

Capítulo 5

Superconductividad mesoscópica

Una muestra superconductora es considerada mesoscópica si alguna de sus dimensiones es del orden de al menos una de sus dos longitudes características [5], la longitud de coherencia $\xi(T)$ o la longitud de penetración $\lambda(T)$. Al tener una muestra con estas dimensiones aparecen nuevas e interesantes propiedades superconductoras. Los campos críticos termodinámicos, los máximos en la curva de magnetización, los valores de campo en los cuales ocurre la entrada y salida de vórtices, varían con la geometría de la muestra. La respuesta magnética de un material superconductor en contacto con diferentes tipos de materiales es uno de los aspectos de la física del estado sólido que más ha sido estudiado en los últimos años. Las aplicaciones actuales de superconductores de altas temperatura incluyen artefactos magnéticos que protegen sistemas médicos de imagen, SQUIDS, sensores de infrarrojo, aceleradores de partículas, transporte de vehículos de levitación, creación de altos campos magnéticos y en generadores. En medicina, son utilizados en imágenes por resonancia magnética (MRI). Es sabido que cuando un superconductor está en contacto con otro material, los efectos de proximidad pueden inducir dominios locales donde la nucleación de la superconductividad es favorecida [1-2]. El interés entre superconductividad mesoscópica, magnetismo y demás materiales se ha extendido al estudio de nano-estructuras híbridas. Estudios previos han mostrado que los parámetros críticos superconductores como corriente crítica, campo crítico, temperatura crítica pueden ser modificados fuertemente construyendo estas nano-estructuras [3-5].

A escala microscópica se usan dispositivos superconductores para interferencia cuántica (SQID) y juntas Josephson, que son elementos básicos del moderno escanador magnético del cerebro y herramientas de diagnóstico del corazón que utilizan la detección de campos electromagnéticos de ultravioleta, y también usados

como Qubits, base del hardware de los futuros computadores. Estas aplicaciones dependen del comportamiento de los vórtices magnéticos dentro de los dispositivos, especialmente a escala mesoscópica. El comportamiento de los vórtices dependen del confinamiento, esto es evidente al realizarse medidas de parámetros eléctricos, magnéticos y de calor.

Capítulo 6

Teoría de Shanenko e Ivanov

De acuerdo a esta teoría [6] la ecuación de Ginzburg-Landau no lineal para un superconductor bajo campo magnético está dado por:

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{2e\vec{A}}{c} \right)^2 \Psi(\vec{r}) + (\alpha + 2V_{conf}(\vec{r}))\Psi(\vec{r}) + \beta|\Psi(\vec{r})|^2\Psi(\vec{r}) = 0 \quad (6.1)$$

Para el caso particular en donde el potencial de confinamiento V_{conf} es nulo dentro de la muestra superconductora, $V_{conf}(\vec{r}) = 0$, e infinito en la frontera, $V_{conf}(\vec{r}) = \infty$. La ecuación anterior se reduce a:

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{2e\vec{A}}{c} \right)^2 \Psi(\vec{r}) + \alpha\Psi(\vec{r}) + \beta|\Psi(\vec{r})|^2\Psi(\vec{r}) = 0 \quad (6.2)$$

Ahora bien α es de la forma $\alpha_0 + \alpha_c$, donde α_0 esta asociado a la longitud de coherencia usual y α_c es la energía debido al confinamiento.

Cuando $T \rightarrow T_c$, $\alpha_0 \rightarrow 0$

Para materiales no mesoscópicos tenemos que $\alpha = \alpha_0$, debido a que los efectos de confinamiento no son muy importantes, y por lo tanto cuando $T \rightarrow T_c$, $\alpha \rightarrow 0$

En cambio en materiales mesoscópicos, donde el efecto de confinamiento se hace importante, cuando $T \rightarrow T_c$, $\alpha \rightarrow \alpha_c$. Bajo este régimen la ecuación (6.2) toma la forma:

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{2e\vec{A}}{c} \right)^2 \Psi(\vec{r}) + \alpha_c\Psi(\vec{r}) + \beta|\Psi(\vec{r})|^2\Psi(\vec{r}) = 0 \quad (6.3)$$

Primero desarrollemos $\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{2e\vec{A}}{c} \right)^2 \Psi(\vec{r})$

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{2e\vec{A}}{c} \right)^2 \Psi(\vec{r}) &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{2e\vec{A}}{c} \right) \Psi(\vec{r}) \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{2e\vec{A}}{c} \right) \Psi(\vec{r}) \\
 &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{2e\vec{A}}{c} \right) \Psi(\vec{r}) \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) - \frac{2e\vec{A}}{c} \Psi(\vec{r}) \right) \\
 &= -\hbar^2 \vec{\nabla}^2 \Psi(\vec{r}) + i\hbar \frac{2e}{c} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) \Psi(\vec{r}) + \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) + \frac{4e^2}{c^2} \vec{A} \Psi(\vec{r})
 \end{aligned} \tag{6.4}$$

Ahora desarrollemos $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} \Psi(\vec{r})$ en coordenadas cartesianas

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \Psi(\vec{r}) &= \frac{\partial A_x \Psi(\vec{r})}{\partial x} + \frac{\partial A_y \Psi(\vec{r})}{\partial y} + \frac{\partial A_z \Psi(\vec{r})}{\partial z} \\
 &= \Psi(\vec{r}) \left(\frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} \right) \\
 &= \Psi(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{r})
 \end{aligned} \tag{6.5}$$

Puesto que $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, tenemos:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} \Psi(\vec{r}) = \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) \tag{6.6}$$

Por lo tanto la ecuación 6.1 queda:

$$\frac{1}{2m} \left(-\hbar^2 \vec{\nabla}^2 + \frac{4e}{c} i\hbar \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + \frac{4e^2}{c^2} \vec{A}^2 \right) \Psi(\vec{r}) + \alpha \Psi(\vec{r}) + \beta |\Psi(\vec{r})|^2 \Psi(\vec{r}) = 0 \tag{6.7}$$

Ahora debemos escoger \vec{A} tal que $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$

Para esto tomamos el gauge de Ginzburg:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r} \quad (6.8)$$

Comprobación:

Utilicemos la identidad:

$$\vec{\nabla} \times (\vec{C} \times \vec{D}) = \vec{C} (\vec{\nabla} \cdot \vec{D}) - \vec{D} (\vec{\nabla} \cdot \vec{C}) + (\vec{D} \cdot \vec{\nabla}) \vec{C} - (\vec{C} \cdot \vec{\nabla}) \vec{D} \quad (6.9)$$

Entonces tenemos:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{A} &= \frac{1}{2} \vec{\nabla} \times (\vec{B} \times \vec{r}) \\ &= \frac{1}{2} [\vec{B} (\vec{\nabla} \cdot \vec{r}) - \vec{r} (\vec{\nabla} \cdot \vec{B}) + (\vec{r} \cdot \vec{\nabla}) \vec{B} - (\vec{B} \cdot \vec{\nabla}) \vec{r}] \\ &= \frac{1}{2} \left[3B_z \hat{k} + \left(x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} \right) B_z - B_z \frac{\partial}{\partial z} (x \hat{i} + y \hat{j} + z \hat{k}) \right] \\ &= B_z \hat{k} = \vec{B} \end{aligned} \quad (6.10)$$

Para materiales mesoscópicos $\vec{B} \approx \vec{H}$, así que:

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \frac{1}{2} \vec{H} \times \vec{r} \\ &= \frac{1}{2} H (-y \hat{i} + x \hat{j}) \end{aligned} \quad (6.11)$$

Por lo tanto, tenemos:

$$\vec{A}^2 = \frac{1}{4} H^2 (x^2 + y^2) \quad (6.12)$$

$$\begin{aligned}
\vec{A} \cdot \vec{\nabla} &= \frac{1}{2}H \left(-y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} \right) \\
&= \frac{1}{2}H \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\
&= \frac{1}{2}H \left(-\frac{1}{i\hbar} \right) L_z
\end{aligned} \tag{6.13}$$

En donde L_z es el momento angular en la dirección \hat{k}

Por lo tanto la ecuación (6.7) en coordenadas cilíndricas toma la forma:

$$\left[-\frac{1}{2m} \hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{L^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{2m} \left(-2 \frac{e\hbar}{c} HL + \frac{e^2}{c^2} H^2 \rho^2 \right) + \alpha_c + \beta |\Psi(\vec{r})|^2 \right] \Psi(\vec{r}) \tag{6.14}$$

Donde L es el momento angular del sistema de partículas.

Se definen las siguientes cantidades:

$$\gamma = \frac{-2m}{\hbar^2} \alpha_c \quad \sigma = \frac{-2m}{\hbar^2} \beta \quad \mu = \frac{eH}{c\hbar}$$

De acuerdo ha estas cantidades la ecuación (6.14) es ahora:

$$\left[-\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{L^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + (-2\mu HL + \mu^2 H^2 \rho^2 - \gamma) + \sigma |\Psi(\vec{r})|^2 \right] \Psi(\vec{r}) \tag{6.15}$$

Capítulo 7

Funcional de acción

La ecuación (6.15), de acuerdo a la teoría variacional de funcionales, es una Ecuación de Euler-Lagrange de la funcional S , denominada funcional de acción, y está dada por:

$$\int \Psi^*(\vec{r}) \left[- \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{L^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + (-2\mu HL + \mu^2 H^2 \rho^2 - \gamma +) + \sigma |\Psi(\vec{r})|^2 \right] \Psi(\vec{r}) \quad (7.1)$$

Minimizando esta ecuación con respecto a $\Psi^*(\vec{r})$ obtenemos (6.15) como ecuación de Euler-Lagrange.

Para minimizar esta funcional con respecto a $\Psi(\vec{r})$, se realizan los siguientes cálculos

$$G_\Psi = \frac{L^2}{\rho} - 2\mu HL + \mu^2 H^2 \rho^2 - \gamma + |\Psi(\vec{r})|^2 \Psi^*(\vec{r}) \quad (7.2)$$

$$G_{q_1} = \Psi^*(\vec{r}) \quad (7.3)$$

$$G_{s_1} = \rho \Psi^*(\vec{r}) \quad (7.4)$$

$$G_{s_2} = \rho \Psi^*(\vec{r}) \quad (7.5)$$

Donde

$$q_1 = \frac{\partial}{\partial \rho} \Psi(\vec{r}) \quad (7.6)$$

$$s_1 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \Psi(\vec{r}) \quad (7.7)$$

$$s_2 = \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi(\vec{r}) \quad (7.8)$$

Entonces la ecuación de Euler-Lagrange con respecto

$$\Psi(\vec{r})$$

es

$$G_\Psi - \frac{\partial}{\partial \rho} \Psi(\vec{r}) + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \rho \Psi(\vec{r}) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rho \Psi(\vec{r}) \quad (7.9)$$

$$\left[- \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{L^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + (-2\mu HL + \mu^2 H^2 \rho^2 - \gamma +) + \sigma |\Psi(\vec{r})|^2 \right] \Psi^*(\vec{r}) \quad (7.10)$$

Que es la misma ecuación (6.15)

Capítulo 8

Solución de la ecuación de Ginzburg-Landau no lineal

Para el caso no lineal, se considera la ecuación (6.15). Consideremos la siguiente funcional de prueba como solución:

$$\Psi(\vec{r}) = \Gamma(\rho, z)e^{iL\phi} \quad (8.1)$$

Con

$$\Gamma(\rho, z) = Q_0 \rho^L e^{\frac{-\rho^2 \mu}{2} \Omega(a_m, L+1, \rho^2 \mu)} F(z) \quad (8.2)$$

Donde

$$a_m = \frac{1}{2} - \frac{1}{4\mu} (\gamma - \Lambda) \quad (8.3)$$

Donde λ es una constante a determinar, y $F(z)$ es una funcional a determinar por minimización de la funcional asociada a la ecuación (6.15), es decir la funcional dada por (7.1).

Remplazando la funcional de prueba en (7.1) tenemos:

$$S = \int \Gamma(\rho, z) \left[- \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{L^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + (-2\mu HL + \mu^2 H^2 \rho^2 - \gamma) + \frac{1}{2\pi} \sigma |\Gamma(\rho, z)|^2 \right] \Gamma(\rho, z) \quad (8.4)$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{L^2}{\rho^2} &= \frac{1}{\Omega} \left[\frac{d^2 \Omega}{d \rho^2} + \frac{d \Omega}{d \rho} \left(\frac{2L}{\rho} - 2\rho\mu + \frac{1}{\rho} \right) + (-2\mu - 2L\mu + \rho^2\mu^2) \Omega \right] Q(\rho) \\
 &= \frac{\mu}{\Omega} \left[4 \frac{d^2 \Omega}{d P^2} + \frac{d \Omega}{d P} (-P + L + 1) + (-2 - 2L + \rho^2\mu) \Omega \right] Q(\rho)
 \end{aligned} \tag{8.5}$$

$$\begin{aligned}
 S &= \int \rho d\rho dz Q(\rho) F(z) \left[-\frac{F\mu}{\Omega} \left[4P \frac{d^2 \Omega}{d P^2} + 4 \frac{d \Omega}{d P} (-P + L + 1) + (-2 - 2L + \rho^2\mu) \Omega \right] Q(\rho) \right. \\
 &\quad \left. - Q(\rho) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + (-2\mu HL + \mu^2 H^2 \rho^2 - \gamma) + \frac{1}{2\pi} \sigma |\Gamma(\rho, z)|^2 \right] Q(\rho) F(z)
 \end{aligned} \tag{8.6}$$

$$\begin{aligned}
 S &= \int \rho d\rho dz Q(\rho) F(z) \left[-\frac{4F\mu}{\Omega} \left[P \frac{d^2 \Omega}{d P^2} + \frac{d \Omega}{d P} (-P + L + 1) + \left(\frac{\gamma}{4\mu} - \frac{1}{2} \right) \Omega \right] Q(\rho) \right. \\
 &\quad \left. - Q(\rho) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \frac{1}{2\pi} \sigma |\Gamma(\rho, z)|^2 \right] Q(\rho) F(z)
 \end{aligned} \tag{8.7}$$

La ecuación de Kummer es:

$$P \frac{d^2 \Omega}{d P^2} + \frac{d \Omega}{d P} (-P + L + 1) = \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{4\mu} (\gamma - \Lambda) \right] \Omega \tag{8.8}$$

Entonces la ecuación (8.7) se reduce a

$$S = \int \rho d\rho dz Q(\rho) F(z) \left[-\Lambda - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2\pi} \sigma |Q(\rho)|^2 |F(z)|^2 \right] Q(\rho) F(z) \tag{8.9}$$

De acuerdo a (8.9), debemos considerar las siguientes integrales

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \int \rho d\rho |Q(\rho)|^2 \\
 &= Q_0^2 \int \rho^{2L+1} e^{-\rho^2\mu} \Omega^2(a_m + L + 1, \mu\rho^2) d\rho
 \end{aligned} \tag{8.10}$$

$$\begin{aligned}
 I_2 &= \int \rho d\rho |Q(\rho)|^4 \\
 &= Q_0^4 \int \rho^{4L+1} e^{-2\rho^2\mu} \Omega^4(a_m + L + 1, \mu\rho^2) d\rho
 \end{aligned} \tag{8.11}$$

Se realiza el cambio de variable: $t = \rho^2 \mu$ que implica $dt = 2\rho\mu d\rho$ o $d\rho = \frac{1}{2\rho\mu} dt$

Entonces las expresiones para I_1 y I_2 son

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{Q_0^2}{2\mu} \int \rho^{2L} e^{-\rho^2 \mu} \Omega^2(a_m + L + 1, \mu\rho^2) dt \\ &= \frac{Q_0^2}{2\mu^{L+1}} \int t^L e^{-t} \Omega^2(a_m, L + 1, t) dt \end{aligned} \quad (8.12)$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \frac{Q_0^4}{2\mu} \int \rho^{4L} e^{-2\rho^2 \mu} \Omega^4(a_m + L + 1, \mu\rho^2) dt \\ &= \frac{Q_0^4}{2\mu^{L+1}} \int t^{2L} e^{-2t} \Omega^4(a_m, L + 1, t) dt \end{aligned} \quad (8.13)$$

Sea $J_1 = \int t^L e^{-t} \Omega^2(a_m, L + 1, t) dt$ y $J_2 = \int t^{2L} e^{-2t} \Omega^4(a_m, L + 1, t) dt$, y además por la condición de normalización tenemos:

$$I_1 = \frac{Q_0^2}{2\mu^{L+1}} J_1 = 1 \quad (8.14)$$

Esto implica

$$Q_0^2 = \frac{2\mu L + 1}{J_1} \Rightarrow Q_0^4 = \frac{4\mu L + 2}{J_1^2} \quad (8.15)$$

y por lo tanto

$$I_2 = 2\mu \frac{J_2}{J_1^2} \quad (8.16)$$

Los valores de I_2 para diferentes valores de flujo μ y para diferentes valores de radio interno R_i son cercanos al valor de π . Lo cual indica que esta integral está relacionada con la función elíptica de Jacobi $K(k)$, definida de esta forma

$$K(k) = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{(1-u^2)(1-k^2u^2)}} du \quad (8.17)$$

Donde para $K(0) = \frac{\pi}{2}$

En nuestro caso el valor de K , obtenido lo denominamos K_2 , de tal forma que

$$I_2 = 2K_2 \quad (8.18)$$

Remplazando I_1 y I_2 en (8.9)

$$S = \int dz F(z) \left[-\Lambda - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2\pi} \sigma K_2 |F(z)|^2 \right] F(z) \quad (8.19)$$

Sea $D = \frac{\sigma K_2}{\pi}$

La ecuación de Euler-Lagrange para (8.19) es

$$\left[\Lambda + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + -D|F(z)|^2 \right] \quad (8.20)$$

La solución de esta ecuación es

$$F(z) = m \sqrt{\frac{2\Lambda}{2\Lambda + D(C^2 - 1)}} \operatorname{Sn} \left(\sqrt{\frac{\lambda(2\Lambda - D)}{2\Lambda + D(C^2 - 1)}} z, \sqrt{\frac{D}{2\Lambda - D}} C \right) \quad (8.21)$$

Donde C es una constante a determinar y Sn es la función seno elíptica de Jacobi

De las condiciones de frontera, tenemos:

$$\frac{\sqrt{\Lambda(2\Lambda - D)}}{\sqrt{g2\Lambda + D(C^2 - 1)}} = 2K_1 \quad (8.22)$$

Donde g es $1/d$ y K_1 es un valor de la funcional elíptica de Jacobi que debemos determinar.

$$\frac{\sqrt{\Lambda(2\Lambda - D)}}{\sqrt{2\Lambda + D(C^2 - 1)}} = 2gK_1 \Rightarrow \sqrt{2\Lambda - D} = \frac{\sqrt{2\Lambda + D(C^2 - 1)}}{\sqrt{\Lambda}} 2gK_1 \quad (8.23)$$

De esto (8.21) queda

$$F(z) = m \sqrt{\frac{2\Lambda}{2\Lambda + D(C^2 - 1)}} \operatorname{Sn} \left(2gK_1 z, \frac{1}{2gK_1} \sqrt{\frac{D\Lambda}{2\Lambda + D(C^2 - 1)}} C \right) \quad (8.24)$$

Consideremos la integral

$$P_1 = \int_0^1 \text{Sn}^2(2gK_1z, k) dz \quad (8.25)$$

Con el cambio de variable $t = 2gK_1 - 1z$, tenemos que $dz = 1/2gK_1$.

Cuando $z = d \Rightarrow t = 2gK_1d = 2K_1$, por lo tanto

$$P_1 = \frac{1}{2gK_1} \int_0^{2K_1} \text{Sn}^2(t, k) dz \quad (8.26)$$

Normalización:

$$\int |F(z)|^2 dz = C^2 \left(\frac{2\Lambda}{2\Lambda + C^2(C^2 - 1)} \right) \frac{1}{2gK_1} \int_0^{2K_1} \text{Sn}^2(t, k) dz \quad (8.27)$$

Sea

$$M_1 = \int_0^{2K_1} \text{Sn}^2(t, k) dz \quad (8.28)$$

Por lo tanto

$$\int |F(z)|^2 dz = C^2 \left(\frac{2\Lambda}{2\Lambda + C^2(C^2 - 1)} \right) \frac{1}{2gK_1} M_1 \quad (8.29)$$

Por consiguiente de la condición de normalización $\int |F(z)|^2 dz = 1$, tenemos:

$$C = \sqrt{\frac{2\Lambda + D(C^2 - 1)}{2\Lambda}} \sqrt{\frac{2gK_1}{M_1}} \quad (8.30)$$

Remplazando C en (8.24) tenemos:

$$\begin{aligned} F(z) &= \frac{2gK_1}{M_1} \text{Sn} \left(2gK_1z, \sqrt{\frac{D}{4gK_1M_1}} \right) \\ &= \frac{2gK_1}{M_1} \text{Sn} \left(2gK_1z, \sqrt{\frac{\sigma K_2}{4gK_1M_1}} \right) \end{aligned} \quad (8.31)$$

Así que

$$k = \sqrt{\frac{\sigma K_2}{4gK_1M_1}} \quad (8.32)$$

A partir de esta relación podemos calcular k y por lo tanto K_1 con métodos iterativos o con el cálculo de raíces de esta expresión de manera numérica.

De (8.23) y (8.30) se obtiene:

$$\begin{aligned} \Lambda &= 4g^2K_1^2 + \frac{DgK_1}{M_1} \\ &= 4g^2K_1^2 + \frac{2\sigma K_2gK_1}{M_1} \end{aligned} \quad (8.33)$$

Con esta expresión y (8.3) podemos calcular la energía de confinamiento en el régimen no lineal.

Bibliografía

- [1] Wolfgang Nolting. *Fundamentals of Many-body Physics*. Springer, 2009.
- [2] Sakurai.J.J *Modern Quantum Mechanics*. Pearson, 1994.
- [3] Kittel, C. *Introduction to Solid State*. John Wiley & Sons.Ic, 2005.
- [4] J.B. Ketterson and S.N. Song *Superconductivity*. Northwestern University,Cambridge University Press,1999.
- [5] J.Barba-Ortega, M.R. Joya. *Superconductividad Mesoscopica*. Universidad Nacional de Colombia. 2004.
- [6] A.A. Shanenko, V.A. Ivanov *Efects of Confining Interactions in meso-superconductors*. Joint Institute for Nuclear Research, 2004.
- [7] L.Elsgoltz *Ecuaciones diferenciales y Calculo Variacional*. Editorial Mir,1977..
- [8] Pedro Nel Sanchez Lotero *Vortices en sistemas superfluidos con simetría longitudinal*. Universidad de Alicante. 2012.

ANEXOS

Apéndice A

Minimización de funcionales

Para hallar la función $\Phi(\vec{r})$ [7], con $\vec{r} = (x_1, x_2, \dots, x_i)$, que minimice la funcional $F[\Phi(\vec{r})]$, dada por:

$$F[\Phi(\vec{r})] = \int G\left(x_1, x_2, \dots, x_i, \Phi(\vec{r}), \frac{\partial}{\partial x_1}\Phi(\vec{r}), \dots, \frac{\partial}{\partial x_i}\Phi(\vec{r}), \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}\Phi(\vec{r}), \dots, \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\Phi(\vec{r})\right) dx_1 dx_2 \dots dx_i \quad (\text{A.1})$$

Se debe resolver la ecuación de Euler-Lagrange, dada por:

$$G_\Phi - \frac{\partial}{\partial x_1}G_{q_1} - \dots - \frac{\partial}{\partial x_i}G_{q_i} - \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}G_{s_1} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}G_{s_i} = 0 \quad (\text{A.2})$$

sujeta a condiciones de frontera. Donde

$$q_1 = \frac{\partial}{\partial x_1}\Phi(\vec{r}), \dots, q_i = \frac{\partial}{\partial x_i}\Phi(\vec{r}) \quad (\text{A.3})$$

$$s_1 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}\Phi(\vec{r}), \dots, s_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\Phi(\vec{r}) \quad (\text{A.4})$$

Cuando en el integrando G de la funcional hay más de una función, se debe plantear una ecuación de Euler-Lagrange por cada función.