

Notas para el alumno de
Mecánica Estadística Avanzada

Índice general

1. Prefacio	3
2. Introducción: Fenomenología Básica	4
2.1. Teorías fenomenológicas I	8
2.1.1. El estado intermedio y corrientes críticas	10
2.2. Teorías fenomenológicas II	13
2.2.1. Teoría de London	13
2.2.2. Consecuencias termodinámicas	15
2.2.3. Ecuaciones de London en términos del potencial vector	16
2.2.4. Ecuaciones de London en geometrías no-conexas	18
2.2.5. Limitaciones de la teoría fenomenológica de London	21
3. Mecanismos Microscópicos	24
3.1. La interacción electrón fonón	27
3.2. El modelo de <i>jellium</i>	30
3.3. El par de Cooper	32
3.4. Pares de Cooper II	35
4. Teoría BCS a temperatura cero	38
4.1. Algunas propiedades de la solución BCS	42
4.2. Estados excitados en la teoría BCS	44
5. Teoría BCS a temperatura finita	47
5.0.1. Predicciones de la teoría a temperatura finita	50
6. Aplicaciones de la teoría BCS	54
6.0.2. Cálculo de probabilidades de transición	55
6.0.3. Transporte en uniones túnel	59
6.0.4. El efecto Josephson	63
7. Temas Avanzados	67
7.0.5. Derivación microscópica	68
7.0.6. Aplicación a problemas unidimensionales	72
7.0.7. La intercara N-S y la reflexión de Andreev	74
7.0.8. La intercara S-N-S: reflexiones de Andreev múltiples	77

Capítulo 1

Prefacio

El tomar apuntes constituye uno de los principales desvelos de los alumnos en los cursos de licenciatura. De hecho, algunos alumnos desarrollan una sorprendente habilidad en esta materia. Sin embargo, muchas veces el esfuerzo puesto en tomar notas lleva a desatender el contenido de lo que se discute en clase. Desde este punto de vista resulta de gran utilidad el disponer de textos que se ajusten al programa de cada asignatura. Lamentablemente, en el caso de asignaturas avanzadas como Mecánica Estadística Avanzada, sólo disponemos de textos que cubren de manera parcial diversas partes del programa.

Las presentes notas tienen por objeto cubrir esta necesidad, al menos en forma provisional. Han sido elaboradas en base a mis notas personales preparadas durante el dictado de la asignatura en los cursos 92/93 y 93/94. Si bien no tienen el nivel de elaboración que se podría esperar de un libro de texto pueden resultar un buen complemento para los que se discute en clase.

Las notas se organizan en ocho capítulos: introducción y fenomenología básica, teorías fenomenológicas I, teorías fenomenológicas II, mecanismos microscópicos, teoría BCS a temperatura cero, teorías BCS a temperatura finita, aplicaciones de la teoría BCS y un último capítulo dedicado a temas avanzados en el que se estudian las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes y algunas de sus aplicaciones. A su vez, cada capítulo se encuentra dividido en secciones que se corresponden, aproximadamente, con cada una de las clases individuales que constituyen el curso.

Las notas están provistas también de una serie de ejercicios y problemas que pueden utilizarse en la evaluación. Hacemos aquí la distinción entre ejercicios, en los que típicamente se requieren pequeños desarrollos algebraicos y problemas propiamente dichos que tienen por objeto aplicar los conceptos generales al análisis de una situación particular.

Espero que estas notas puedan resultar también de utilidad a futuros profesores de la asignatura.

Capítulo 2

Introducción: Fenomenología Básica

Descubrimiento de la superconductividad:

Hacia 1908 el físico holandés Kamerling Onnes había conseguido licuar helio logrando $T < 4K$. Hacia 1911 estudia la resistividad del mercurio y encuentra un comportamiento como se muestra en la figura:

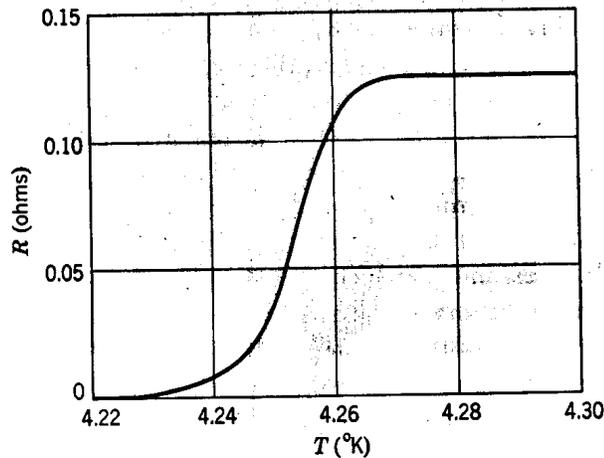


Figura 2.1: Resistencia del Hg como función de T

Lo más sorprendente para Onnes no fue encontrar que $R \rightarrow 0$ para $T \rightarrow 0$ ya que esto era de esperar si el metal fuera lo suficientemente puro. Había, al menos, dos motivos para sorprenderse:

- 1) La desaparición de la resistividad no era gradual sino abrupta (R se reducía varios órdenes de magnitud en un intervalo de $0,02K$).

- 2) La resistividad por debajo de la transición no aumentaba al agregar impurezas.

Onnes se dió cuenta que estaba ante un nuevo tipo de *transición de fase* y llamó **superconductor** al estado del mercurio por debajo de los $4K$. El mismo tipo de transición fue detectado luego en otros metales y el fenómeno fue llamado **superconductividad**.

La temperatura a la cual R se anula se llama *temperatura crítica* T_c y es una propiedad característica de cada material superconductor. Entre los metales puros la más alta T_c es la del niobio ($T_c(Nb) = 9,25K$) y la más baja es la del tungsteno ($T_c(W) = 0,015K$).

A medida que se lograban temperaturas más bajas se descubría que nuevos metales eran superconductores. No se puede descartar que, a temperaturas no alcanzadas aún en el laboratorio, todos los metales se vuelvan superconductores.

Es instructivo echar un vistazo a la distribución de los superconductores conocidos sobre la tabla periódica (podemos tomar, por ejemplo, la tabla que viene en el capítulo 34 del libro de Aschcroft y Mermin). Vemos que:

- No sólo los metales pueden ser superconductores. También algunos semiconductores como *Si* o *Ge* pueden serlo cuando se aplica presión o cuando se preparan en láminas delgadas.
- Los metales con orden magnético (*Fe*, *Co*, *Ni*, etc.) no son superconductores.

La incompatibilidad entre campos magnéticos y superconductividad es un hecho general que ya había sido detectado por el propio Onnes: encontró que un campo magnético suficientemente grande podía destruir la superconductividad. Además observó que el proceso era *reversible*: al quitar el campo magnético se recuperaba la superconductividad.

Por aquel entonces la resistividad nula era la única propiedad que caracterizaba al estado superconductor, es decir que el superconductor era equivalente a un *conductor perfecto*. Esta idea llevaba a pensar que el estado superconductor no podía ser un estado de equilibrio termodinámico. La razón era la siguiente:

$$R = 0 \implies E_{int} = 0 \implies \frac{\partial B_{int}}{\partial t} = 0$$

Es decir, ya que el campo eléctrico debe ser *siempre* cero en el interior del superconductor, no puede haber variaciones en el campo magnético en el interior. Esto nos lleva a la siguiente paradoja:

Consideremos los dos siguientes procesos para alcanzar un determinado estado ($T < T_c, H < H_c(T)$).

- 1) A $T > T_c$ el metal se coloca en el campo magnético H . El campo dentro del metal es igual al de fuera ya que la permeabilidad de un metal normal es prácticamente 1. Al bajar T por debajo de T_c el campo en el interior debe seguir siendo B ya que en el estado superconductor $\dot{B} = 0$.
- 2) La muestra se enfría a campo cero y luego se aumenta el campo externo. En este caso B_{int} continuara siendo nulo al aumentar el campo ya que $\dot{B} = 0$.

Llegamos a la conclusión que para unas dadas condiciones externas de campo y temperatura el campo en el interior del superconductor depende de la *trayectoria* seguida para alcanzar dichas condiciones. En otras palabras, el estado superconductor en un campo magnético no es un estado de equilibrio termodinámico ya que existen infinitos estados que se pueden alcanzar dependiendo de la trayectoria seguida.

Esta era la situación hasta que en 1933 Meissner descubrió lo que pasaría a ser la segunda propiedad fundamental del estado superconductor. Junto con su colaborador Ochsenfeld, Meissner se dedicó a medir el campo magnético alrededor de una muestra superconductora enfriada siguiendo distintas trayectorias en el plano (H, T) y concluyeron que *siempre* el campo debía ser expulsado completamente del interior de la muestra. Es decir, en el estado superconductor B_{int} es siempre nulo.

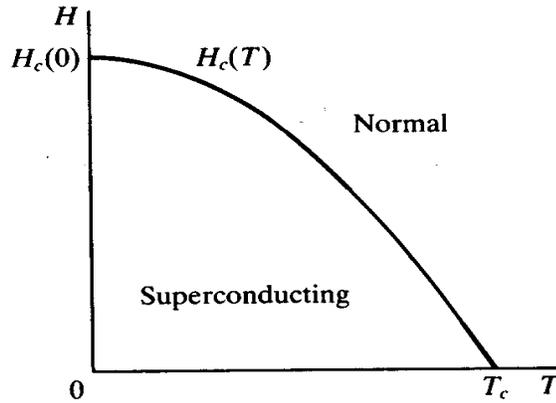


Figura 2.2: Diagrama de fases del estado SC

A esta propiedad se le llama **efecto Meissner**. Debe notarse que el efecto Meissner NO es una consecuencia de $R = 0$ que en todo caso implica $B_{int} = cte$. Al determinar unívocamente el campo en el interior del superconductor, el efecto Meissner permite reconciliar $R = 0$ con el equilibrio termodinámico.

Notar que el efecto Meissner es equivalente a tener *diamagnetismo perfecto*. Como $B_{int} = H + 4\pi M$, siendo M la magnetización, se tiene:

$$B_{int} = 0 \implies \chi = M/H = \frac{-1}{4\pi}$$

El diagrama de fases de un superconductor tradicional es como se muestra en la figura 2.2. A partir del descubrimiento del efecto Meissner se comienza a aplicar con éxito las leyes de la termodinámica para analizar las propiedades del estado superconductor.

El calor específico:

Otro de los hechos experimentales básicos que caracterizan al estado SC es el comportamiento del calor específico. Recordemos que para un metal normal

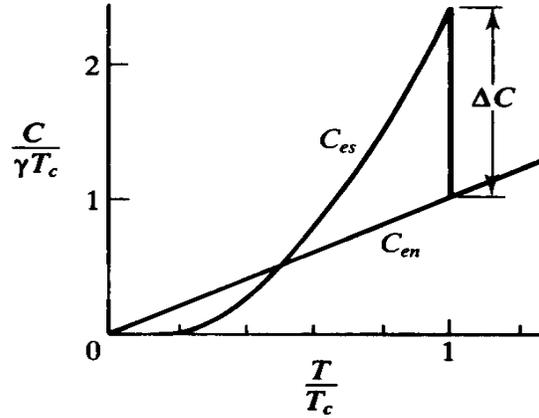


Figura 2.3: Calor específico en el estado SC (c_{es}) y en el estado normal (c_{en}) como función de la temperatura

$$c_n = AT + BT^3$$

donde el término lineal se debe a las excitaciones electrónicas y el término cúbico a las vibraciones de la red. Eliminando la parte debida a los fonones (que por otra parte es despreciable cuando $T \ll \theta_D$, siendo θ_D la temperatura de Debye) lo que se observa experimentalmente que c presenta una discontinuidad en $T = T_c$, característica de toda transición de fase de 2do. orden.

En la región de muy bajas temperaturas se observa que $c_s \sim e^{-\alpha/T}$. Este hecho, como veremos, nos dice mucho sobre la naturaleza del estado superconductor y en particular de su espectro de excitaciones. Notemos simplemente que $c_s \rightarrow 0$ más rápidamente que c_n con lo cual o bien menos electrones contribuyen a c_s o bien la entropía del estado SC es menor a la del estado normal. Veremos que ambas afirmaciones son ciertas.

2.1. Teorías fenomenológicas I: Termodinámica del estado superconductor

Vamos a comenzar este curso con la revisión de las teorías fenomenológicas sobre el estado superconductor. Como su nombre lo indica, estas teorías no nos permiten explicar el fenómeno desde “primeros principios” (o sea a partir de leyes fundamentales) pero sí sirven para sistematizar un conjunto de hechos fundamentales y vincularlos unos con otros. Como veremos, estas teorías resultaron ser una valiosa guía para el desarrollo de la teoría microscópica.

Comenzaremos por analizar el fenómeno desde el punto de vista de la termodinámica. Vimos en la clase anterior que el efecto Meissner garantiza la existencia de un único estado de equilibrio para cada valor del campo magnético externo H y la temperatura T . Queremos saber que información pueden proporcionar las leyes de la termodinámica acerca de la transición superconductor tomándolo al efecto Meissner como un postulado a cumplir.

¿Cuál será el potencial termodinámico que se debe minimizar para un superconductor en presencia de un campo magnético?

Repasemos algo de termodinámica. Sabemos que en un sistema mecánicamente aislado (o sea que no se realiza trabajo) y a temperatura constante el estado de equilibrio es aquel que minimiza la energía libre de Helmholtz:

$$F = E - TS$$

Sin embargo, para un superconductor en un campo magnético si hay un trabajo ya que al introducir H se induce una magnetización en el sistema. Por tanto no podemos decir que F sea mínima en este caso.

Para encontrar el potencial a minimizar comenzemos por calcular el trabajo que realiza el campo sobre el sistema. La energía de interacción de un momento magnético \vec{M} en un campo \vec{H} es:

$$U = -\vec{M} \cdot \vec{H}$$

Luego, el trabajo realizado para pasar de \vec{M} a $\vec{M} + \Delta\vec{M}$ es:

$$\Delta W = -\Delta U = H \cdot \Delta M$$

donde hemos supuesto, de aquí en más, que \vec{H} y \vec{M} son paralelos. Conociendo el trabajo podemos calcular la variación en la energía interna por el primer principio:

$$\Delta E = \Delta Q + \Delta W = T\Delta S + H \cdot \Delta M$$

Análogamente, en el caso de un fluido a presión y temperatura constante:

$$\Delta E = T\Delta S - P\Delta V$$

lo cual nos permite asociar P con $-H$ y ΔV con ΔM . Esta analogía nos dice que el potencial a minimizar es la energía libre de Gibbs $G = F + PV$, que en el caso del superconductor se expresa:

$$G = E - TS - HM$$

Tomando el diferencial total de esta expresión e imponiendo las condiciones $\Delta T = \Delta H = 0$ se comprueba que $\Delta G = 0$.

Analicemos ahora la expresión de G para el estado normal y para el estado superconductor. En el caso normal $M \approx 0$ con lo cual:

$$G_n(T, H) = E - TS = G_n(T, 0)$$

En el caso superconductor $M = -H/(4\pi)$ debido al efecto Meissner. Para obtener G_s hay que obtener $\partial G_s/\partial H$ e integrar:

$$\begin{aligned} dG_s = -SdT - MdH &\implies \frac{\partial G_s}{\partial H} = -M = \frac{H}{4\pi} \\ \implies G_s(T, H) &= G_s(T, 0) + \frac{H^2}{8\pi} \end{aligned}$$

Esto indica que el estado superconductor será más estable que el normal mientras $G_s < G_n$. Al aumentar H , G_s aumenta hasta igualar G_n . Sobre la curva de transición tenemos:

$$G_n(T, H_c(T)) = G_s(T, H_c(T)) \implies G_n(T, 0) - G_s(T, 0) = \frac{H_c^2(T)}{8\pi} \quad (2.1)$$

Hay mucha información que se puede extraer de esta relación. Lo haremos en forma de problema (**problema nro. 1**):

- 1) A partir de la relación (1) estimar la diferencia de energía entre el estado normal y el estado superconductor a temperatura cero para distintos metales (usar los valores de H_c tabulados por ejemplo en el libro de Ashcroft y Mermin).
- 2) Demostrar a partir de (1) que

$$S_n - S_s = -\frac{H_c}{4\pi} \frac{dH_c}{dT}$$

Como $\frac{dH_c}{dT} < 0 \forall T$ esto indica que $S_n > S_s \forall T$. Por otra parte $H_c(T_c) = 0$ mientras que $\frac{dH_c}{dT}(T_c) = cte$ resulta $S_n(T_c) = S_s(T_c)$.

- 3) Demostrar que

$$c_n - c_s = -\frac{T}{8\pi} \frac{d^2 H_c^2}{dT^2}$$

Esta relación indica que hay una discontinuidad en c para $T = T_c$, como corresponde a una transición de segundo orden.

- 4) En muchos superconductores se cumple razonablemente la relación universal

$$\frac{H_c(T)}{H_c(0)} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2$$

- a) usar esta relación para estimar la discontinuidad en el calor específico y compararla con resultados experimentales para distintos metales.
- b) Determinar la ley que debe seguir el calor específico con la temperatura en un superconductor, sabiendo que en el caso normal $c_n \sim T$ y tomando como cierta la relación parabólica para el campo crítico.

2.1.1. El estado intermedio y corrientes críticas

Lo que hemos visto hasta aquí sobre el efecto Meissner corresponde a una situación experimental ideal en la cual todo el material está o bien en el estado superconductor o bien en el estado normal. En esta situación la magnetización aumenta linealmente como función del campo externo hasta que se alcanza el campo crítico H_c y luego se hace cero. Sin embargo, en una situación real lo que se obtiene es una curva de magnetización como muestra la figura 2.4.

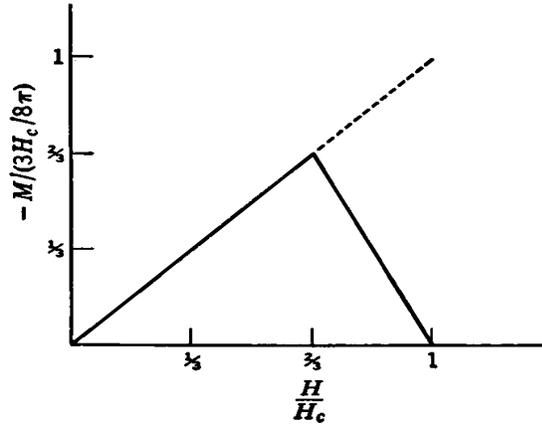


Figura 2.4: Curva de magnetización en un caso real

Vamos a considerar el caso de una esfera para mostrar que la situación ideal no siempre puede darse. Las líneas de campo fuera de la esfera son las que corresponden a un campo magnético uniforme (el campo externo) más el campo debido al momento magnético inducido en la esfera, que es equivalente al de un dipolo magnético en su centro. El campo por tanto no es uniforme en el exterior de la esfera, siendo menor en los polos (orientados según el campo exterior) que en su ecuador. Por tanto, al aproximarnos al campo crítico, tenemos un campo neto mayor que el crítico en la región del ecuador y un campo menor que el crítico en la región de los polos. Existirá un campo $H_{inf} < H_c$ para el cual el campo en el ecuador de la esfera es igual al crítico. Este es el valor donde la curva de magnetización alcanza su valor máximo (ver figura 2.4).

Cuando $H_{inf} < H < H_c$ no todo el material puede pasar al estado normal y tampoco puede todo el material ser superconductor. El resultado es que para estos valores del campo magnético el material contiene regiones normales y superconductoras, de aquí el nombre de *estado intermedio*. Hay dos preguntas que surgen aquí:

- 1) ¿Cuál es el valor de H_{inf} para una geometría dada y en particular para el caso de la esfera?
- 2) ¿Cómo se distribuyen las regiones normales y superconductoras dentro del material?

La primera pregunta es relativamente fácil de contestar. Consideremos la esfera en una situación con efecto Meissner completo. El campo en el exterior

es la superposición de un campo uniforme y el creado por un dipolo magnético $\frac{4}{3}\pi R^3 M$ ubicado en el centro de la esfera, donde $M = -H_{int}/4\pi$ es la magnetización. El campo en el interior H_{int} es uniforme pero no es igual al campo externo H . Por magnetostática sabemos que $H_{int} = 3H/2$. Por tanto el campo máximo para el cual se tiene Meissner completo en todo el material es $H_{inf} = 2H_c/3$ como se ve en la figura 2.4.

En general $H_{inf} = xH_c$, siendo $x < 1$ un factor que depende de la geometría. x se puede relacionar con el factor de *demagnetización* n , definido por:

$$H_{int} = H - 4\pi nM$$

Tomando $H_{int} = H_c$ y $M = -H_{int}/(4\pi)$ se obtiene $x = 1 - n$. Lo cual indica que para eliminar el estado intermedio deber ser $n = 0$. Esta situación se obtiene para un cilindro infinito orientado en la dirección del campo externo.

Acerca de la distribución de las regiones normales y superconductoras, la intuición sugeriría que la región del ecuador de la esfera pasa al estado normal y el resto sigue siendo superconductor. Sin embargo esto lleva a una contradicción ya que para que haya equilibrio en la interfase entre la región normal y la superconductora debe ser $H_{interfase} = H_c$. Pero en la zona normal tendríamos $H < H_c$ porque al pasar al estado normal las líneas de campo se descomprimen con lo cual el material debería volverse superconductor.

Para lograr el equilibrio es necesario alternar láminas de estado normal en las que $B_{int} = H_c$ y láminas superconductoras con $B_{int} = 0$. Las láminas se orientan paralelas al campo magnético externo. Se pueden observar directamente utilizando limaduras de hierro sobre la muestra. Los interesados pueden encontrar más detalles sobre el fenómeno en el libro de Abrikosov.

Vamos a considerar ahora que ocurre cuando el superconductor conduce corriente. ¿Es posible aumentar indefinidamente la corriente a través de un material superconductor?

Evidentemente no. Un mecanismo evidente que destruye la superconductividad es que la corriente genera un campo magnético y existirá, por tanto, una corriente crítica I_c para la cual este campo es igual al campo crítico H_c . Desde este punto de vista la corriente crítica deberá depender de la geometría de la muestra.

Como ejemplo consideremos un cable superconductor cilíndrico de radio a . ¿Cuál será el valor de I_c ? Por ley de Ampere

$$H(r) = \frac{2I}{cr} \implies I_c = \frac{caH_c}{2}$$

A este fenómeno se lo llama *efecto Silsbee*. Notar que para que el material este en el estado superconductor $B_{int} = 0$, con lo cual la densidad de corriente no puede ser uniforme sino que tiene que estar limitada a una delgada capa superficial. Luego $B = 0$ en el interior excepto en esta capa.

Para $I > I_c$ se tiene una situación similar a la del estado intermedio en un campo magnético externo: uno puede suponer ingenuamente que la superconductividad se destruye primero en una capa superficial. La corriente fluiría entonces en una capa interfacial de radio $r_{int} < a$. Pero entonces $H_{int} > H_c$, con lo cual el estado normal debería avanzar hacia el centro del cilindro y destruir la superconductividad en todo el cable. Pero en ese caso la corriente se distribuiría

uniformemente, siendo la densidad $I/(\pi a^2) \rightarrow I(r) = Ir^2/a^2$. Luego el campo se reducirá hacia el centro ya que $B(r) = 2Ir/(ca^2)$ y entonces $H_{centro} < H_c$ y no podemos estar en el estado normal. Nuevamente encontramos una contradicción.

Esta contradicción se resuelve suponiendo que el interior del cable ($r < r_{int}$) se encuentra en un estado *intermedio*. La distribución de láminas normales y superconductoras no es fácil de determinar. Hay cálculos que muestran que las regiones superconductoras forman discos alrededor del eje de simetría del cilindro.

Cuando $I > I_c$ debe comenzar a observarse una resistividad finita en el cable. Como problema (**problema nro. 2**) les propongo determinar una expresión teórica para $R(I)$ con $I > I_c$ con la siguiente ayuda:

- 1) En la región en el estado intermedio $H(r) = H_c$.
- 2) En la región normal la densidad de corriente es uniforme.
- 3) Determinar la distribución de corriente en la zona $r < r_{int}$ a partir de 1) y 2) estableciendo continuidad en la densidad de corriente para $r = r_{int}$.
- 4) Tener en cuenta que las secciones transversales del cable deben ser equipotenciales.

2.2. Teorías fenomenológicas II: Electrodinámica del estado superconductor

2.2.1. Teoría de London

En la aplicación de las leyes de la termodinámica al estado superconductor que acabamos de ver el efecto Meissner era un postulado que debía cumplirse. No sabemos nada aún sobre su origen microscópico. Pero antes que eso, no sabemos como se las apañan las leyes del electromagnetismo para dar lugar a un apantallamiento perfecto del campo B en el interior del material. Comencemos por estudiar el comportamiento del campo en las proximidades de la superficie del material superconductor.

La ecuación $\vec{\nabla} \times \vec{H} = 0$ nos dice que $H_{int\parallel} = H_{ext\parallel} = B_{ext\parallel}$ ya que no hay corrientes libres sobre la superficie.

Por otra parte la ecuación $\vec{\nabla} B = 0$ implica $\vec{B}_{int} \cdot \hat{n} = \vec{B}_{ext} \cdot \hat{n} = \vec{H}_{ext} \cdot \hat{n} = 0$, con lo cual \vec{H} debe ser paralelo a la superficie. Por otra parte como $B_{int\parallel} = 0$ y $B_{ext\parallel} = H_{ext\parallel} \neq 0$ tenemos una discontinuidad en el campo B tangencial. Esto indica que debe haber una densidad de corriente superficial inducida sobre el conductor. Llamaremos \vec{J}_s a la densidad de corriente. Las ecuaciones de Maxwell nos dicen que:

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{J}_s$$

Utilizando el teorema de Stokes es fácil ver que

$$H_{ext\parallel} = B_{ext\parallel} - B_{int\parallel} = \frac{4\pi}{c} K_s$$

donde $K_s = J_s \Delta A / \Delta l$ es la densidad superficial de corriente (ΔA es el área con corriente no nula que corresponde a un elemento de arco Δl paralelo a la superficie). Esta densidad de corriente superficial es la que apantalla al campo magnético exterior. Por tratarse de un superconductor esta corriente será una *supercorriente*, es decir que fluye sin disipación.

En un tratamiento macroscópico del problema se puede considerar que la corriente fluye sólo en una capa de espesor infinitesimal. Sin embargo, sabemos que este espesor debe ser finito ya que si no tendríamos que $J_s \rightarrow \infty$ sobre la superficie, lo cual no ocurre en realidad.

El espesor en el cual $J_s \neq 0$ se llama *longitud de penetración* y se denota por λ . Los primeros en señalar la existencia de esta longitud característica fueron los hermanos F. y H. London, quienes introdujeron hacia 1930 una teoría fenomenológica que permite describir el comportamiento del campo magnético sobre la superficie de un superconductor.

Para deducir las ecuaciones de London vamos a suponer válida una aproximación clásica para los electrones dentro del superconductor. Si un electrón no sufre colisiones (conductividad perfecta), la ecuación clásica de movimiento es:

$$m_e \frac{d\vec{v}}{dt} = e\vec{E}$$

donde \vec{E} es el campo eléctrico. Como, por otra parte $\vec{J}_s = n_e e \vec{v}$, donde n_e es la densidad electrónica, se tiene:

$$\left(\frac{m_e}{n_e e^2} \right) \frac{d\vec{J}_s}{dt} = \vec{E}$$

Notar que estamos suponiendo que *todos* los electrones son acelerados por el campo.

En esta aproximación clásica se puede considerar a los electrones como un fluido. Tenemos entonces:

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}$$

y el termino debido al gradiente se puede despreciar si \vec{v} es pequeña frente a \vec{v}_F (la velocidad de Fermi). Se obtiene así la primera ecuación de London:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Lambda \vec{J}_s) = \vec{E} \quad (2.2)$$

donde $\Lambda = m_e / (n_e e^2)$. Por otra parte, la ley de Faraday nos dice que:

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \implies \frac{\partial}{\partial t} \left(\Lambda \vec{\nabla} \times \vec{J}_s + \frac{1}{c} \vec{B} \right) = 0$$

Hasta aquí no hay nada más que las propiedades de un conductor perfecto. Lo nuevo surge al imponer que en el interior del material tanto \vec{J}_s como \vec{B} sean cero, con lo cual no sólo la derivada del paréntesis debe ser cero sino la propia expresión entre paréntesis:

$$\Lambda \vec{\nabla} \times \vec{J}_s + \frac{1}{c} \vec{B} = 0 \quad (2.3)$$

Las ecuaciones (2.2) y (2.3) son la base de la teoría de London para describir la electrodinámica del estado superconductor. Estas ecuaciones, en combinación con las ecuaciones de Maxwell deben permitir obtener la distribución de campos en presencia de superconductores. Vamos a ver como la ecuación (2.3) lleva al efecto Meissner y nos permite determinar la longitud de penetración λ . De acuerdo con las ecuaciones de Maxwell tenemos:

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{J}_s \implies \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{B} = -\nabla^2 \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{\nabla} \times \vec{J}_s$$

Introduciendo esta expresión en (2.3) se obtiene la ecuación para \vec{B} :

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{4\pi}{c^2 \Lambda} \vec{B}$$

Esta ecuación se puede resolver para ciertas geometrías sencillas. Por ejemplo, en el caso de un plano en presencia de un campo exterior paralelo a la superficie se obtiene:

$$B(x) = H e^{x/\lambda} \quad \text{si } (x < 0)$$

donde $\lambda^2 = (4\pi n_e e^2)/(c^2 m_e)$ para el campo en el interior del superconductor. La densidad de corriente está dada asimismo por

$$J_s(x) = \frac{cH}{4\pi\lambda} e^{x/\lambda} \quad \text{si } (x < 0)$$

Vemos, por tanto, que los campos y las corrientes están presentes sólo en una capa superficial de espesor λ . Sabiendo que $n_e \sim 10^{23}/\text{cm}^3$, los valores que se obtienen para λ están entre $10^{-5} - 10^{-6}\text{cm}$, es decir unos 1000 Å.

¿Cómo se compatibiliza esta teoría con el hecho de que a $T = T_c$ el campo debe penetrar completamente, es decir $\lambda(T_c) \rightarrow \infty$?

Para dar cuenta de esto es claramente necesario reemplazar n_e por una fracción más pequeña $n_s(T)$ tal que $n_s(T_c) \rightarrow 0$. Esta fracción de la densidad total de electrones se puede interpretar como la densidad de electrones *superconductores*. Esta idea se corresponde con el *modelo de dos flúidos* también utilizado para describir el *He* superfluido.

Sugiero el siguiente problema sobre este tema (**problema nro. 3**):

Determinar la distribución de campo magnético para superconductores con las siguientes geometrías en un campo externo uniforme H :

- a) Lámina infinita de espesor D (campo paralelo a la lámina).
- b) Cilindro infinito de radio a (campo paralelo al eje de simetría).
- c) Esfera de radio R .

2.2.2. Consecuencias termodinámicas

En el análisis termodinámico del estado superconductor hemos supuesto que el efecto Meissner era *completo*. La presencia de campo magnético y corrientes inducidas en una capa de espesor λ obliga en principio a revisar este análisis termodinámico para tomar en cuenta estos efectos de superficie.

En primer lugar, hay que tomar en cuenta una contribución adicional a la energía interna debida a la supercorriente. La potencia que entrega el campo eléctrico será:

$$P = J_s E = \Lambda J_s \frac{\partial J_s}{\partial t} = \frac{\Lambda}{2} \frac{\partial J_s^2}{\partial t} \implies E_{J_s} = \frac{1}{2} \Lambda J_s^2$$

Por otra parte, al suponer que el efecto Meissner era completo teníamos que la energía libre de Gibbs aumentaba en $H^2/8\pi$ debido a la expulsión del campo. Es fácil ver que si tomamos en cuenta que $B \neq 0$ en el interior este término pasa a ser $(H - B)^2/8\pi$, es decir, un poco menor. De esta forma, la expresión de la energía libre de Gibbs para el superconductor pasa a ser:

$$G_s(T, H) = G_s(T, 0) + \frac{(H - B)^2}{8\pi} + \frac{1}{2} \Lambda J_s^2$$

Se puede demostrar, utilizando las ecuaciones de London, que lo que aumenta G debido a J_s es menos que lo que disminuye debido a B . Por tanto, la energía libre media por unidad de volumen es menor en una lámina delgada que en el volumen del material y, por tanto, el campo crítico de una lámina delgada es mayor que el de volumen.

Problema nro. 4: determinar el campo crítico de una lámina delgada de espesor d con longitud de penetración λ . Demostrar que para $d \ll \lambda$, $H_c(\text{lámina}) \approx (\lambda/d)H_c$.

2.2.3. Ecuaciones de London en términos del potencial vector

Vamos a analizar ahora la expresión de las ecuaciones de London en términos de un potencial vector. Veremos que de esta forma se obtiene información acerca de cómo debe ser una teoría microscópica apropiada para el estado superconductor.

Sea \vec{A} tal que

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B} \\ \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \end{cases}$$

De la ecuación (2.2) se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Lambda \vec{J}_s) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

mientras que de (2.3) se obtiene:

$$\Lambda \vec{\nabla} \times \vec{J}_s = -\frac{1}{c} \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

Resulta tentador reemplazar estas dos expresiones por una única ecuación aún más sencilla:

$$\vec{J}_s = -\frac{1}{\Lambda c} \vec{A} \quad (2.4)$$

Sin embargo, esta expresión puede no tener sentido físico para algunas elecciones del gauge para \vec{A} . Recordemos que existe cierta libertad para la elección del gauge ya que los campos físicos E y B no cambian al hacer los cambios $\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\chi$ y $\phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}$ en el potencial escalar.

La condición sobre \vec{A} para que valga la ecuación (2.4) proviene de la ecuación de continuidad:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{\partial \rho_s}{\partial t} = 0 \implies \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s = 0$$

ya que no hay acumulaciones de carga en las situaciones que vamos a estudiar. Sobre la superficie del conductor esta condición es equivalente a $\vec{J}_s \hat{n} = 0$.

Luego, la ecuación (2.4) valdrá siempre que $\vec{\nabla}\vec{A} = 0$ y $\vec{A}\cdot\hat{n} = 0$ sobre la superficie. A esta elección del gauge se le llama gauge de London o gauge *transversal*. La pregunta que uno se formula es si estas condiciones fijan unívocamente a \vec{A} en todo el espacio o queda todavía cierta libertad.

Para analizar esta pregunta consideremos la transformación:

$$\begin{aligned}\vec{A}' &= \vec{A} + \vec{\nabla}\chi \\ \phi' &= -\frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t}\end{aligned}$$

Para que (2.4) valga con \vec{A}' debe ser $\nabla^2\chi = 0$ y $\vec{\nabla}\chi\cdot\hat{n} = 0$ sobre la superficie. Pero sabemos por los cursos de análisis que dadas estas condiciones en un recinto *simplemente conexo*, entonces la solución es $\chi = cte$, con lo cual $\vec{A}' = \vec{A}$ y entonces \vec{A} queda unívocamente determinado por las condiciones $\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = 0$ y $\vec{A}\cdot\hat{n} = 0$ sobre la superficie. Dejamos para luego el análisis de lo que ocurre cuando el superconductor no define un recinto simplemente conexo.

El propio F. London hacia el año 1940 se dió cuenta de una posible justificación microscópica para la ecuación (2.4). Su análisis se basó en suponer que el estado superconductor debe ser un estado coherente cuántico a escala macroscópica, es decir que puede ser descrito por una función de onda macroscópica ψ tal que $|\psi|^2$ nos da la densidad de electrones superconductores n_s . Esta función de onda describiría el movimiento coherente de todos los electrones a escala macroscópica.

Si esto es así, la corriente J_s en ausencia de campo se obtendrá aplicando el operador corriente a este estado, es decir:

$$\vec{J}_s = \frac{e\hbar}{2mi} \left[\psi^* \vec{\nabla}\psi - \vec{\nabla}\psi^* \psi \right]$$

En ausencia de campo $J_s = 0$. El sistema está en su estado fundamental y hay un teorema debido a Bloch que demuestra que el estado fundamental de un sistema cuántico tiene impulso medio cero. Cuando se aplica un campo \vec{A} la función de onda se perturba (pasa de ψ a ψ') y el operador corriente también cambia. Recordar que J_s está asociado a v y $mv = (p - eA/c)$. Luego, la corriente en presencia de \vec{A} será:

$$\vec{J}_s = \frac{e\hbar}{2mi} \left[\psi'^* \vec{\nabla}\psi' - \vec{\nabla}\psi'^* \psi' \right] - \frac{e^2}{mc} \vec{A} |\psi'|^2$$

El primer término se conoce como parte paramagnética y el segundo como parte diamagnética. Si suponemos que $\psi' \approx \psi$ entonces la parte paramagnética se anula y obtenemos:

$$\vec{J}_s \approx -\frac{e^2}{mc} |\psi|^2 \vec{A} = -\frac{e^2 n_s}{mc} \vec{A} = -\frac{1}{\Lambda c} \vec{A}$$

La condición para obtener la ecuación de London es que $\psi' \approx \psi$, es decir que la función de onda no se perturbe, al menos a primer orden en teoría perturbaciones. Esto ocurrirá si existe un *gap* de energía entre el estado fundamental y los estados excitados. Se dice entonces que la función de onda es *rígida*. De una manera similar se explica el diamagnetismo en un sistema atómico.

2.2.4. Ecuaciones de London en geometrías no-conexas

En el caso de un recinto no-conexo, como por ejemplo un cilindro hueco, las condiciones $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ y $\vec{A} \cdot \hat{n} = 0$ sobre la superficie no garantizan la unicidad de \vec{A} . Esto está indicando que, o bien no vale la ecuación de London así escrita para recintos no-conexos, o bien esta admite múltiples soluciones. Vamos a ver que esto último es lo correcto y veremos además que estas soluciones son tales que el flujo magnético está cuantizado, es decir que se trata de un conjunto discreto de soluciones.

Para comenzar, no podemos considerar válida la ecuación (2.4) en este caso, sino las anteriores (2.2) y (2.3):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\Lambda \vec{J}_s) &= \vec{E} \\ \Lambda \vec{\nabla} \times \vec{J}_s &= -\frac{1}{c} \vec{B} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Calculemos ahora el flujo magnético a través del cilindro:

$$\Phi = \int \int \vec{B} \cdot d\vec{s} = \oint \vec{A} d\vec{l}$$

Como no vale la ecuación (2.4), no podemos asegurar que $\Phi = -\Lambda c \oint \vec{J}_s d\vec{l}$. Llamaremos *fluxoide* Φ' a:

$$\Phi' = \Phi + \Lambda c \oint \vec{J}_s d\vec{l}$$

Vamos a demostrar que Φ' no depende del tiempo, aún cuando los campos externos varíen temporalmente. Veremos asimismo que Φ' es independiente del camino que encierra el hueco del cilindro. Calculemos, en primer lugar, la variación temporal de Φ' :

$$\frac{\partial \Phi'}{\partial t} = \int \int \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{s} + c\Lambda \oint \frac{\partial \vec{J}_s}{\partial t} d\vec{l} = -c \int \int \vec{\nabla} \times \vec{E} \cdot d\vec{s} + c \oint \vec{E} d\vec{l}$$

que se anula debido al teorema de Gauss. Esto demuestra que $\Phi' = cte$ independiente del tiempo.

Por otra parte, notemos que si Φ' se calcula sobre un circuito que no incluye el hueco (es decir que queda dentro del material) se obtiene $\Phi' = 0$, porque se trata de un recinto conexo dentro del cual vale la ecuación (2.4) y por tanto vale $c\Lambda \vec{\nabla} \times \vec{J}_s = -\vec{B} \implies \Phi' = 0$. Es fácil ver entonces que cualquier trayectoria que encierra el hueco del cilindro da el mismo valor para Φ' ya que estas trayectorias se pueden deformar a voluntad añadiendo circuitos cerrados sobre el material (como muestra la figura 2.5).

Para demostrar la cuantificación de Φ' vamos a concentrarnos primero en un cilindro de espesor $d \gg \lambda$. En ese caso, lejos de las paredes del cilindro $\vec{j}_s \approx 0$ y sobre un circuito en el que se anula la supercorriente tenemos $\Phi' = \Phi$. Además $\vec{B} \approx 0$ y entonces $\vec{A} = \vec{\nabla} \chi$ lejos de las paredes. Luego:

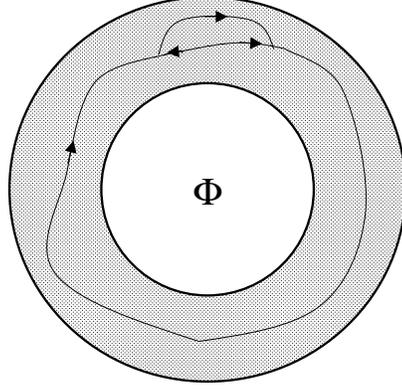


Figura 2.5: Deformación de una trayectoria cerrada que contiene el hueco del cilindro añadiendo un circuito cerrado sobre el material

$$\Phi = \int \int \vec{B} \cdot d\vec{s} = \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \oint \vec{\nabla}\chi \cdot d\vec{l} = \Delta\chi = \chi(\theta) - \chi(\theta + 2\pi)$$

¿Puede ser $\chi(\theta) \neq \chi(\theta + 2\pi)$? Como lo que debe cumplirse es la continuidad en $\vec{\nabla}\chi$ y no en la propia función χ , no hay inconveniente en que $\Delta\chi = cte \neq 0$.

Vemos entonces que cada elección de χ distinta corresponde a un flujo atrapado distinto. Es decir que distintos flujos atrapados se pueden describir mediante un cambio de gauge en el potencial vector.

Para demostrar que no todos los valores de Φ están permitidos es necesario retomar el argumento cuántico de London. Notemos primero que para la geometría cilíndrica tenemos

$$\vec{\nabla}\chi \cdot \hat{\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial\chi}{\partial\theta} = \frac{\Phi}{2\pi r} \implies \chi = \frac{\Phi\theta}{2\pi}$$

donde θ indica el ángulo de coordenadas polares.

Consideremos ahora la función de onda macroscópica que describe el estado superconductor de acuerdo al argumento de London. ¿Qué relación hay entre la función de onda en ausencia de flujo ψ_0 y la función de onda en presencia de flujo ψ_Φ ? La respuesta está en ver que la única modificación que produce el flujo en el Hamiltoniano del sistema está en el término de energía cinética que pasa de $p^2/2m$ a $(\vec{p} - e\vec{A})^2/2m$. Es decir que las autofunciones H_Φ son las autofunciones de H_0 con el impulso según $\hat{\theta}$ desplazado en $e\vec{\nabla}\chi/c$:

$$\psi_\Phi = e^{i\frac{e\chi}{\hbar}} \psi_0 = e^{i\frac{e\Phi\theta}{\hbar c}} \psi_0$$

Entonces los valores de Φ permitidos son aquellos que satisfacen la ecuación de continuidad en la función de onda:

$$\psi_\Phi(\theta) = \psi_\Phi(\theta + 2\pi) \implies \Phi = n \left(\frac{\hbar c}{e} \right)$$

La cantidad $\Phi_0 = hc/e$ se llama *cuanto de flujo magnético* y su valor es $4 \times 10^{-7} \text{gauss.cm}^2$. Lo remarcable es que experimentalmente se obtiene $\Phi = n(hc/2e)$. La discrepancia en el factor 2 se puede interpretar fácilmente como proveniente del hecho de haber supuesto que los portadores de carga son los electrones, mientras parece ser que en realidad son entidades de carga $2e$. Tenemos aquí una pista muy importante sobre la teoría microscópica: los electrones deben formar *pares* en el estado superconductor. Veremos más adelante que esta idea es fundamental en el desarrollo de la teoría BCS.

Para finalizar, podemos ver con un argumento sencillo que lo que se cuantifica en general no es el flujo sino el fluxoide Φ' . Para esto recordemos que $\Lambda \vec{J}_s = m\vec{v}_s/m$ en el argumento fenomenológico de London, luego:

$$\Phi' = \frac{c}{e} \oint (m\vec{v}_s + \frac{e}{c}\vec{A})d\vec{l} = \frac{c}{e} \oint \vec{p} \cdot d\vec{l}$$

Si aceptamos las reglas de cuantificación de Bohr-Sommerfeld obtenemos $\Phi' = n(hc/e)$. Nuevamente obtenemos hc/e en lugar de $hc/2e$ porque hemos supuesto que los portadores son electrones individuales.

Como tarea complementaria a este capítulo es recomendable leer los artículos sobre los primeros experimentos que demostraron la cuantización del flujo en anillos superconductores:

- Doll y Nabäuer, Phys. Rev. Lett. **7**, 51 (1961).
- Deaver y Fairbank, Phys. Rev. Lett. **7**, 43 (1961).
- Little y Parks, Phys. Rev. Lett. **9**, 9 (1962).

2.2.5. Limitaciones de la teoría fenomenológica de London

Vamos a completar nuestra revisión de las teorías fenomenológicas analizando las limitaciones de la teoría de London para describir la electrodinámica del estado superconductor.

En la teoría de London el principal y único parámetro que caracteriza al material es la longitud de penetración λ , cuyo valor está dado por:

$$\lambda_L = \left(\frac{c^2 \Lambda}{4\pi} \right)^{1/2}, \quad \Lambda = \frac{m}{ne^2}$$

Como vimos, para $n \sim 10^{23} e/cm^3$ $\lambda_L < 1000 \text{ \AA}$ (el valor exacto con todos los factores es $\lambda_L \sim 170 \text{ \AA}$). También dijimos que λ debe ser una función de T tal que $\lambda \rightarrow \infty$ para $T \rightarrow T_c$. En la formulación de London λ sólo puede depender de T permitiendo que $n = n_s(T)$ sea lo que llamamos densidad de electrones superconductores tal que $n_s(T_c) = 0$. Por tanto el valor que encontramos para $n \sim 10^{23} e/cm^3$ sólo puede considerarse como una cota *inferior* al valor de $\lambda(T=0)$.

Lo que se encuentra experimentalmente es que λ extrapolado a $T=0$ es siempre *mayor* que el valor London. En algunos casos, por ejemplo en Al , es bastante mayor $\lambda_{Al} \sim 500 \text{ \AA}$. Esta limitación no es muy grave ya que la teoría London no pretende ser cuantitativa. Por el contrario, es sorprendente que λ_L dé el orden de magnitud correcto de $\lambda(0)$.

La limitación más grave surge cuando se estudia la variación de λ con el camino libre medio en aleaciones superconductoras. El camino libre medio ℓ se define como la distancia media que recorre el electrón entre dos colisiones elásticas con un defecto en el cristal (por ejemplo debido a impurezas). ℓ se puede estimar como $\ell^{-1} = n_i \sigma_i$, donde n_i es la densidad de impurezas y σ_i es la sección eficaz de cada impureza. Como el potencial que crean las impurezas en un metal está apantallado por los electrones σ_i tiene aproximadamente dimensiones del área atómica ($\sigma_i \sim 10^{-16} cm^2$). Está claro que ℓ se puede controlar experimentalmente mediante la concentración de impurezas.

Lo que se encuentra experimentalmente es que λ depende *muy fuertemente* de ℓ . Típicamente en muestras con alta concentración de impurezas un aumento de ℓ al doble puede producir una reducción de λ a la mitad. Este comportamiento no puede comprenderse dentro de la teoría London ya que λ_L sólo puede variar si varía n_s , pero una variación de n_s debería afectar también a las magnitudes termodinámicas T_c y H_c que prácticamente no se modifican por efecto de las impurezas.

Los experimentos sobre muestras impuras fueron hechos por primera vez por Pippard hacia los años 50, quién notó la analogía con el efecto *skin* en metales normales. Recordemos que este efecto se refiere al amortiguamiento de los campos eléctricos y magnéticos asociados a una onda electromagnética sobre la superficie de un metal. La variación del efecto skin con ℓ en metales normales se explica reemplazando la ley de Ohm en su versión local ($\vec{J} = \sigma \vec{E}$) por una relación no-local de la forma:

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{3\sigma}{4\pi\ell} \int d^3r' \frac{\vec{R} \left[\vec{R} \vec{E}(\vec{r}') \right]}{R^4} e^{-R/\ell}, \quad \vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'$$

lo cual nos dice que J en \vec{r} depende no sólo de E en \vec{r} sino de su valor en un entorno de radio ℓ alrededor de \vec{r} . De esta manera, si \vec{E} fuera uniforme en dicho entorno se recupera la versión local de la ley de Ohm.

Pippard propuso extender este enfoque al caso superconductor a fin de explicar el comportamiento de metales impuros. En este caso, la ecuación análoga a la ley de Ohm local es la ecuación (2.4), luego Pippard propuso generalizar esta ecuación de la siguiente manera:

$$\vec{J}_s(\vec{r}) = \alpha \int d^3r' \frac{\vec{R} [\vec{R}\vec{A}(\vec{r}')] }{R^4} e^{-R/\xi} \quad , \quad \vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'$$

donde α y ξ son constantes a determinar. α se determina a partir de la condición de recuperar la ecuación (2.4) cuando \vec{A} es uniforme en todo el espacio. Luego:

$$\alpha = \frac{3}{4\pi\xi} \left(\frac{1}{\Lambda c} \right)$$

Discutiremos ahora el significado de ξ . Obviamente, para poder explicar los resultados experimentales ξ debe depender fuertemente de ℓ . De acuerdo a la ecuación de Pippard, cualquier perturbación local en el campo se propaga una distancia del orden de ξ . Si tenemos en cuenta el argumento cuántico de London, esto nos dice que el campo y las corrientes a una cierta distancia tienen que estar vinculados por un efecto de *coherencia cuántica*. ξ mide entonces la *longitud de coherencia* que caracteriza a la función de onda del estado superconductor. Se trata de una nueva escala de longitud, distinta de λ .

¿Cómo podemos estimar ξ ? Comencemos por el caso de un metal puro. El argumento de Pippard se basa en el principio de incerteza. Sólo los electrones en una ventana de energías del orden de kT_c alrededor del nivel de Fermi juegan un papel en la transición superconductor. Estos electrones tienen impulsos en el rango $\Delta p \approx kT_c/v_F$ alrededor del impulso en la superficie de Fermi, donde v_F es la velocidad de Fermi. La incerteza en la posición es entonces

$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{\Delta p} \sim \frac{\hbar v_F}{kT_c}$$

El valor de Δx nos da una estimación de ξ ya que nos da idea del tamaño de un paquete de ondas formado por los electrones con $|E - E_F| < kT_c$. Para metales como el *Al* se obtiene $\xi \sim 10000 \text{ \AA}$, es decir $\xi \gg \lambda_L$. Como λ_L mide la escala en la que varía el campo \vec{A} está claro que para el caso de metales con $\xi \gg \lambda$ la relación entre \vec{A} y \vec{J}_s debe ser *no-local*. Es decir que este tipo de superconductores responden mejor a una descripción tipo Pippard que tipo London (el caso contrario se obtiene cuando $\lambda \gg \xi$).

Discutamos ahora la relación entre ξ (y por tanto λ) con ℓ . El valor de ξ que hemos estimado (10^4 \AA) está bien para un metal puro. Llamemos ξ_0 a este valor. Cuando ℓ es finito y menor que ξ_0 el valor de ξ debe estar determinado por ℓ en lugar de ξ_0 ya que la coherencia cuántica está limitada por ℓ . Con argumentos heurísticos uno puede justificar una relación del tipo

$$\xi^{-1} = \xi_0^{-1} + \ell^{-1}$$

como si tuvieramos los dos mecanismos que limitan la coherencia actuando en paralelo. De esta forma se deduce que $\xi \sim \min(\xi_0, \ell)$.

Para determinar cuál es la longitud de penetración asociada a la relación de Pippard es necesario resolver esta ecuación para una geometría dada (por ejemplo para una superficie plana infinita). Como problema (**problema nro. 5**) les propongo demostrar que, usando la relación de Pippard en el caso $\lambda_L \ll \xi$ se obtiene:

a) $\lambda^3 \sim \lambda_L^2 \xi_0$ para un metal puro.

b) $\lambda^2 \sim \lambda_L^2 (\xi_0/\ell)$ para un metal con impurezas tal que $\lambda \gg \ell$ y $\xi_0 \gg \ell$.

Usando entonces la teoría de Pippard se pueden explicar los resultados experimentales en los que λ disminuye al aumentar ℓ .

Vemos, por otra parte, que reduciendo ℓ podemos tener un cambio de régimen: cómo $\lambda \sim 1/\sqrt{\ell}$ y $\xi \sim \xi_0 \ell / (\xi_0 + \ell)$, podemos pasar de una situación en la que $\lambda \ll \xi$ (para $\ell \rightarrow \infty$) a otra en la que $\lambda \gg \xi$ (para $\ell \rightarrow 0$). Como vimos, en el primer caso la relación entre campos y corrientes es no-local y llamamos a estos superconductores *tipo I*. En el segundo caso vale una descripción local a lo London y se llaman superconductores *tipo II*. En los superconductores tipo II la muestra no pasa directamente al estado superconductor para campos mayores que el crítico sino que existe una región de campos en los que penetran tubos de flujo (vórtices) dentro de la muestra.

Capítulo 3

Mecanismos microscópicos para explicar la superconductividad

Nos proponemos ahora analizar todas las evidencias encontradas en la fenomenología acerca de posibles mecanismos microscópicos que permitan explicar la superconductividad. Como dijimos al principio del curso, esto nos permitirá tener una idea acerca de cuál fue la evolución histórica del pensamiento hasta llegar a la primera teoría microscópica satisfactoria propuesta por Bardeen Cooper y Schrieffer en 1957.

En primer lugar notemos que todas las observaciones nos llevan a una primera y fundamental conclusión:

El estado superconductor corresponde a una nueva fase en la estructura electrónica del sistema.

Es decir, todos los fenómenos indican que sólo las propiedades electrónicas se ven afectadas por la transición. Así se modifican, entre otras, el calor específico electrónico, la susceptibilidad magnética y la conductividad, pero no se modifican propiedades estructurales como el parámetro de red o la estructura cristalina. Notar también que el efecto Meissner nos asegura que se trata de una fase de equilibrio termodinámico y no una fase metaestable.

¿Cómo puede surgir esta nueva fase? Pensemos, como ejemplo, como surge la fase líquida en la transición líquido-vapor. En el gas las moléculas se comportan como *libres*, excepto por las colisiones que mantienen la distribución de velocidades de equilibrio. Su energía cinética es tal que no “sienten” la parte atractiva del potencial y se pueden considerar como esferas duras. En forma muy aproximada, la transición se produce cuando la energía cinética media $E_K \sim 3kT/2$ es del mismo orden que la energía potencial media V_0 . Notar, no obstante, que ni siquiera en el caso de un gas clásico es sencillo describir matemáticamente la transición. Sólo existen unos pocos modelos, tales como el modelo de Ising en 1 y 2 dimensiones, en los que el problema de la transición se puede resolver *exactamente*. De la misma forma, en superconductividad vamos a conformarnos con un modelo aproximado y una solución también aproximada.

Llegamos entonces a la conclusión que, como toda transición de fase, la

superconductividad tiene que ser el producto de cierta interacción entre las partículas del sistema (los electrones, en este caso). También las propiedades termodinámicas y electrodinámicas nos llevan a la conclusión de que la interacción es fundamental en el caso superconductor ya que:

- 1) Un gas de electrones libres nos da un comportamiento lineal del calor específico con la temperatura, en lugar del comportamiento exponencial observado.
- 2) Un gas de electrones libres no presenta el fenómeno de diamagnetismo perfecto observado. Por el contrario, la susceptibilidad magnética de un gas de electrones libres, tomando en cuenta el paramagnetismo de Pauli y el diamagnetismo de Landau es:

$$\chi \sim n_e \mu_B^2 \rho(E_F)$$

lo cual es del orden de 10^{-6} , es decir despreciable frente al valor $-\frac{1}{4\pi}$ del caso superconductor.

¿Cuál es el orden de magnitud de las interacciones que llevan a esta nueva fase?

De forma análoga al caso de la transición líquido vapor podemos estimar V_0 por $V_0 \sim kT_c$ y siendo típicamente $T < 10K$ se obtiene $V_0 \leq 10^{-3}eV$. Otra indicación sobre el orden de magnitud lo encontramos en el valor de la energía de condensación $E_n - E_s = H_c^2 / (8\pi n)$. En este caso $H_c \leq 500G$ y $n \sim 10^{23}/cm^3$ nos dice que $E_n - E_s \leq 10^{-6}eV/e$. ¿Por qué difieren tanto estas dos estimaciones? Una posible explicación es que la interacción no actúa sobre todos los electrones sino sólo sobre una fracción de ellos n_s tal que $E_n - E_s \sim n_s kT_c / n$. Luego n_s/n debería ser del orden de 10^{-3} (para tener una idea, esta relación es aproximadamente igual a kT_c/E_F).

¿Cuál debe ser el “signo” de la interacción? Para poder explicar la reducción de energía frente al estado normal es evidente que la interacción electrón-electrón debería tener una parte, por muy pequeña que sea *atractiva*, lo cual contrasta con el hecho evidente de que la interacción directa entre electrones es *repulsiva*.

Antes de preguntarnos cuál puede ser el origen de esta atracción es instructivo imaginar cuál sería el efecto de una atracción neta entre electrones. En este caso los electrones podrían formar pares que responderían a una estadística de Bose. Lo interesante es que en este caso se podrían utilizar las mismas teorías que sirven para explicar la superfluidez en sistemas de bosones como es el caso del Helio líquido.

La superconductividad y la superfluidez tienen muchos puntos en común. Así, por ejemplo, la conductividad infinita en los superconductores es análoga a la viscosidad nula en *He* superfluido que permite el flujo de *He* sin fricción a través de un capilar. La superfluidez se observa en *He*⁴ pero no en *He*³ lo que lleva a pensar que, en primera aproximación, se trata de una *condensación de Bose*. La teoría de la superfluidez fue desarrollada por Landau en 1941 y durante mucho tiempo se interpretó a la superconductividad como la superfluidez del líquido de electrones. Vamos a analizar entonces que cosas podríamos explicar sobre la superconductividad suponiendo que se trata de una condensación de Bose.

En la condensación de Bose una fracción macroscópica de los bosones se encuentran en el estado fundamental de bosón independiente. Este estado corresponde a $\langle p \rangle = 0$. Las excitaciones de baja energía son fonones con energía $\epsilon(p) = cp$ donde c es la velocidad del sonido en el fluido.

Para comprender por qué este fluido fluye sin fricción vamos a plantearnos el problema equivalente en el que un cuerpo se mueve dentro del fluido estando este último en reposo. Para que este cuerpo transfiera energía al fluido debe haber una excitación de fonones Δn_p (cambio en el número de ocupación) tal que

$$\Delta E = \sum_{p \neq 0} c|p|\Delta n_p$$

y el momento transferido será

$$\Delta \vec{P} = \sum_{p \neq 0} \vec{p}\Delta n_p$$

Tomando en cuenta estas dos ecuaciones se obtiene

$$|\Delta \vec{P}| \leq \sum_{p \neq 0} |p|\Delta n_p = \Delta E/c$$

Por otra parte, si el objeto se mueve con velocidad v , el cambio en su energía cinética será

$$\Delta E = \frac{1}{2}M\Delta v^2 = Mv\Delta v = v\Delta P \implies |\Delta P| = |\Delta E|/v$$

lo cual es imposible a menos que $v > c$. Esto demuestra que no hay transferencia de impulso (o sea no aparece fricción) a menos que $v > c$.

También podríamos explicar el diamagnetismo perfecto suponiendo que tenemos un condensado de bosones cargados. Esto fue propuesto por Schafroth (Phys. Rev. **100**, 463 (1951)). A grandes rasgos, la idea es que siendo $\langle p \rangle = 0$ en el condensado se obtiene $mv_s = \langle p \rangle = -eA/c$ que lleva a la ecuación de London (2.4) (recomiendo leer el artículo).

Para concluir este ejercicio de imaginación propongo el siguiente problema (**problema nro. 6**):

Estimar la temperatura de transición superconductor suponiendo que los electrones se agrupan en pares que son bosones, siendo la densidad de este gas de bosones igual a $n_e/2$.

Con esta hipótesis se encuentran temperaturas mucho más altas (en un factor 10^3) que las reales, lo cual nos lleva a descartar por ahora este modelo. Además, no existe ninguna razón para creer que dos electrones puedan atraerse tan fuertemente como para ser considerados una única partícula bosónica. Haría falta una interacción atractiva muy grande para compensar la repulsión coulombiana y todo parece indicar que las interacciones de que disponemos son muy pequeñas.

En cualquier caso, no vamos a descartar del todo la idea de *apareamiento*. Ya vimos que los experimentos de cuantización del flujo sugieren la presencia de pares de electrones. Por otra parte, el comportamiento del calor específico a $T \rightarrow$

0 parece indicar otra explicación posible para el efecto Meissner: como hemos visto, la existencia de un gap en el espectro de excitaciones (entre el estado fundamental y el primer excitado) nos permitiría al mismo tiempo explicar el comportamiento exponencial del calor específico y el efecto Meissner como consecuencia de la rigidez de la función de onda macroscópica.

En resumen, la teoría microscópica debería ser capaz de explicar los siguientes puntos:

- a) Origen de la interacción atractiva entre electrones.
- b) Formación de pares de electrones.
- c) Aparición del gap en el espectro de excitaciones.

3.1. La interacción electrón fonón

Vamos a considerar un posible origen para la interacción atractiva entre electrones que puede dar lugar a la superconductividad. Hay dos observaciones que indican que las vibraciones de la red juegan un papel importante en superconductividad:

- 1) Una alta resistividad a temperatura ambiente (asociada a la interacción electrón fonón) parece estar asociada con una alta T_c . Tal es el caso de superconductores como Zr , Hf o Nb . Por otra parte, muy buenos conductores como Au , Ag o Cu no son superconductores.
- 2) Efecto isotópico: se observa que tanto T_c como H_c varían como $M^{-1/2}$ al variar la masa utilizando isótopos de un dado elemento. Esta ley es válida especialmente en superconductores blandos como Hg , Sn y Al .

La hipótesis, propuesta por primera vez por Frölich hacia 1950, es que la interacción entre vibraciones de la red (fonones) y electrones puede dar lugar a una *interacción indirecta* electrón-electrón que se puede volver atractiva en un cierto rango de parámetros.

Para analizar esta hipótesis es necesario disponer de un modelo concreto para la interacción electrón-fonón. Vamos a comenzar por escribir un Hamiltoniano genérico, en el formalismo de segunda cuantificación, que incluya electrones fonones y la interacción entre ambos. Supondremos que es posible describir los estados electrónicos en una base de ondas planas $|k\sigma\rangle$, siendo $\hbar k$ el impulso y σ el espín. Los operadores $c_{k\sigma}^\dagger$ y $c_{k\sigma}$ son los que crean y destruyen electrones en los estados $|k\sigma\rangle$. Por tratarse de fermiones, estos operadores cumplen las reglas de conmutación fermiónicas:

$$[c_{k\sigma}, c_{k'\sigma'}]_+ = 0 \quad [c_{k\sigma}^\dagger, c_{k'\sigma'}^\dagger]_+ = 0 \quad [c_{k\sigma}, c_{k'\sigma'}^\dagger]_+ = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{k,k'}$$

La parte electrónica de nuestro Hamiltoniano será:

$$H_{el} = \sum_{k\sigma} \epsilon(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$$

donde $\epsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ es la relación de dispersión para electrones libres. Podemos imaginar que los efectos de interacción electrón-electrón se incluyen por una masa efectiva. Incluso el efecto del potencial periódico debido a los iones puede considerarse incluido en m^* .

De la misma manera supondremos que los fonones están asociados a operadores bosónicos a_q, a_q^\dagger que cumplen reglas de conmutación bosónicas. Supondremos también que existe una única banda (acústica) caracterizada por una relación de dispersión $\omega_q = cq$. Luego, el Hamiltoniano asociado a los fonones será:

$$H_{ph} = \sum_{q\sigma} \hbar\omega_q a_q^\dagger a_q$$

La interacción electrón-fonón proviene del acoplamiento que se produce entre el campo eléctrico o polarización asociada a las vibraciones de la red y la densidad de carga electrónica. Como los operadores a_q están asociados con el desplazamiento de los iones con respecto a la posición de equilibrio u_q en la forma $u_q \sim (a_q^\dagger + a_{-q})$, la forma genérica de la interacción electrón-fonón será:

$$H_{el-ph} = \sum_{kq\sigma} V_q (a_q^\dagger + a_{-q}) c_{k\sigma}^\dagger c_{k+q,\sigma}$$

donde los elementos de matriz V_q dependen en general del modelo específico para fonones y electrones. Esto se discutirá mas adelante. Los procesos básicos generados por este término de acoplamiento se representan en la figura 3.1.

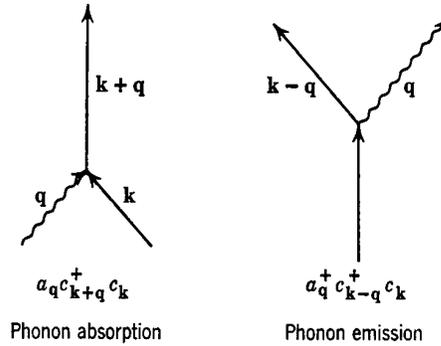


Figura 3.1: La interacción electrón-fonón

¿Cómo puede la interacción electrón-fonón dar lugar a una interacción electrón-electrón atractiva?

Notar que a 2do. orden en H_{el-ph} obtenemos procesos que pueden interpretarse como una interacción electrón-electrón efectiva, que corresponde a un intercambio de fonones entre dos electrones.

La interacción efectiva se puede calcular utilizando teoría de perturbaciones a segundo orden. Hay que tener en cuenta que existen dos posibilidades para el

estado intermedio según el electrón de impulso k emita un fonón de impulso q o absorba un fonón de impulso $-q$. Esto da lugar el elemento de matriz:

$$V_{el-el}^{ef} = \sum_q |V_q|^2 \left[\frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \omega_q} + \frac{1}{\epsilon_{k'} - \epsilon_{k'+q} - \omega_{-q}} \right]$$

Notar que $\epsilon_k - \epsilon_{k-q} = \epsilon_{k'} - \epsilon_{k'+q} = \omega$ es la energía transferida entre electrones. La interacción efectiva se puede reescribir en la forma:

$$V_{el-el}^{ef}(\omega, q) = \frac{2|V_q|^2 \omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2}$$

Es decir, es una interacción efectiva que depende del impulso y la energía transferidos. La dependencia en ω indica retardación (o sea no-localidad temporal) mientras que la dependencia en q indica no-localidad espacial.

Por otra parte, vemos que para $\omega < \omega_q$ se tiene una interacción atractiva. Pero antes de poder asegurar que la interacción neta es atractiva hay que analizar lo que ocurre con la interacción coulombiana entre electrones.

La interacción coulombiana directa en representación de impulsos se describe por un elemento de matriz:

$$V_C(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

que depende del impulso q transferido entre los electrones. Como puede verse $V_C(q)$ diverge cuando $q \rightarrow 0$ indicando el alcance infinito de la interacción. La divergencia se elimina cuando se introduce el apantallamiento debido al resto de los electrones. Hay distintas aproximaciones para tratar el apantallamiento. En la más sencilla, llamada de Thomas-Fermi, el potencial apantallado adquiere la forma:

$$V_C^{apant}(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + q_0^2}$$

donde q_0 es un valor finito que depende de la densidad electrónica y que elimina la divergencia en $V_C(q)$. De esta forma la interacción electrón-electrón completa, incluyendo la interacción mediada por fonones es:

$$V_{el-el}^{ef}(\omega, q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + q_0^2} + \frac{2|V_q|^2 \omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2}$$

La próxima clase veremos como obtener q_0 y V_q en un modelo concreto, llamado *jellium*, en el cual los iones se tratan como un fluido uniforme de carga positiva. El resultado principal que se obtiene es que $2|V_q|^2 = V_C^{apant}(q)$, con lo cual se puede ver que, en efecto, aparece un rango de frecuencias, para $\omega < \omega_q$, en el cual la interacción neta es atractiva.

3.2. El modelo de *jellium*

El modelo más simple para analizar la interacción efectiva entre electrones es el modelo llamado *jellium*, en el cual se considera a los iones como un fluido uniforme de carga positiva. Como la masa de los iones es mucho mayor que la de los electrones es válida la aproximación *adiabática* en la que se supone que la densidad electrónica se ajusta instantáneamente a cualquier cambio en la densidad iónica. De esta manera, si la densidad de iones se pone a oscilar los electrones acompañan el movimiento sin que se produzcan excitaciones (lo contrario no es cierto: los iones no pueden seguir las oscilaciones del plasma electrónico que ocurre a frecuencias mucho mayores que las frecuencias características asociadas a los fonones).

Como primer paso en este ejercicio nos proponemos determinar la relación de dispersión para las vibraciones de la densidad de iones en este modelo. Vamos a concentrarnos en la región de longitud de onda larga (modos longitudinales) y comenzaremos por suponer que la densidad electrónica no se modifica (suponemos que actúa como un fondo de carga uniforme negativo).

Sean $\rho_i(\vec{r})$ y $\rho_e(\vec{r})$ las densidades de iones y electrones en el punto \vec{r} respectivamente y sea $\vec{u}_i(\vec{r})$ el desplazamiento de la densidad de iones con respecto al equilibrio, que supondremos muy pequeño. En equilibrio la neutralidad de carga impone:

$$Ze\rho_i = e\rho_e = en_e$$

donde Z es la carga de los iones. Cuando hay una variación en la densidad de carga aparece un campo eléctrico de acuerdo a la relación:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi e(Z\rho_i - \rho_e)$$

El desplazamiento $\vec{u}_i(\vec{r})$ y la densidad en cada punto deben estar relacionados. Es fácil demostrar que si $\vec{u}_i(\vec{r})$ es pequeño se tiene:

$$\rho_i(\vec{r}) \approx \rho_{i0}(1 - \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_i(\vec{r})) = \frac{n_e}{Z}(1 - \vec{\nabla} \cdot \vec{u}_i(\vec{r}))$$

Luego,

$$\vec{E} \approx -4\pi en_e \vec{u}_i(\vec{r})$$

Por otra parte, la ecuación de movimiento para los iones en presencia de este campo es:

$$M\ddot{\vec{u}}_i(\vec{r}) = -4\pi Ze^2 n_e \vec{u}_i(\vec{r}) \implies \Omega^2 = \frac{4\pi Ze^2 n_e}{M}$$

Ω es la frecuencia con la que oscilarían los iones si los electrones no se movieran. Se llama frecuencia de *plasma* para los iones y es el análogo exacto de la frecuencia de plasma para los electrones $\omega_p^2 = 4\pi e^2 n_e/m$.

Ahora bien, en el caso de los iones es fundamental tener en cuenta como se modifica Ω por efecto del movimiento electrónico. Para tener esto en cuenta es necesario determinar el apantallamiento del campo eléctrico debido al gas de electrones. Hay que destacar que el gas de electrones es muy eficiente en

apantallar perturbaciones de longitud de onda larga comparada con la longitud de onda de Fermi. El campo eléctrico apantallado se puede expresar en la forma:

$$\vec{E}_{apant} = -\frac{4\pi en_e \vec{u}_i}{\varepsilon_{el}(q)}$$

donde $\varepsilon_{el}(q)$ es la constante dieléctrica del gas de electrones y q el vector de onda de la oscilación. Para obtener $\varepsilon_{el}(q)$ utilizaremos la aproximación de Thomas-Fermi que consiste en resolver la ecuación de Poisson para el gas de electrones suponiendo que el único efecto de la perturbación es desplazar localmente la energía de los electrones de manera que:

$$\epsilon(k, r) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - e\varphi(r)$$

donde $\varphi(r)$ es el potencial electrostático. Para $\varphi(r)$ pequeño se obtiene:

$$\varepsilon_{el}(q) = 1 + \frac{q_0^2}{q^2} \quad \text{donde} \quad q_0^2 = 4\pi e^2 \frac{\partial n}{\partial \mu}$$

donde $\frac{\partial n}{\partial \mu}$ es la derivada de la densidad electrónica con respecto del potencial químico. Por otra parte, es fácil ver que q_0^{-1} determina la longitud de apantallamiento. A temperatura cero se obtiene:

$$q_0 \sim k_F \left(\frac{r_s}{a_0} \right)^{1/2}$$

donde a_0 es el radio de Bohr y r_s la distancia media entre electrones. Como $r_s \sim 2 - 6 a_0$ para densidades metálicas, se obtiene $q_0 \sim k_F$, es decir que la longitud de apantallamiento en metales es del orden de la distancia interatómica.

Una vez apantallado el campo eléctrico, se obtiene que la frecuencia de oscilación del plasma iónico depende del vector de onda, en la forma:

$$\omega^2(q) = \frac{4\pi(Ze)^2 n_i}{M \left(1 + \frac{q_0^2}{q^2} \right)} \implies \omega(q) \approx v_s q \quad \text{siendo} \quad v_s^2 = \frac{4\pi(Ze)^2 n_i}{M q_0^2}$$

El último paso para obtener la interacción efectiva entre electrones en el modelo jellium es tomar en cuenta el apantallamiento de la interacción coulombiana debido a los iones. En lugar de proceder como en la clase anterior buscamos una constante dieléctrica que tenga en cuenta tanto el efecto de los electrones como el de los fonones. Es decir, buscamos $\varepsilon(q, \omega)$ tal que $\varphi_{tot} = \varphi_{ext}/\varepsilon(q, \omega)$.

Para determinar $\varepsilon(q, \omega)$ notemos que $\varphi_{tot} = \delta\varphi_{el} + \delta\varphi_{ion} + \varphi_{ext}$. $\varepsilon(q, \omega)$ contendrá una parte debida a los electrones y otra debida a los iones pero no sabemos cómo combinarlas. Si ε_{el} es la parte debida a los electrones tenemos $\varphi_{tot} = (\delta\varphi_{ion} + \varphi_{ext})/\varepsilon_{el}$, mientras que ε_{ion} debe cumplir $\varphi_{tot} = (\delta\varphi_{el} + \varphi_{ext})/\varepsilon_{ion}$. Deducimos de esta forma que

$$(\varepsilon_{el} + \varepsilon_{ion} - \varepsilon)\varphi_{tot} = \varphi_{ex} + \delta\varphi_{el} + \delta\varphi_{ion}$$

y, por tanto

$$\varepsilon = \varepsilon_{el} + \varepsilon_{ion} - 1$$

Para obtener $\varepsilon(q, \omega)$ sólo nos resta entonces obtener ε_{ion} . Si suponemos el fondo de electrones fijo, el plasma de iones responde a un campo externo como un oscilador forzado de frecuencia Ω . La ecuación de movimiento para el desplazamiento es

$$\ddot{u}_i + \Omega^2 u_i = \frac{ZeE_{ext}}{M}$$

En esta ecuación hemos despreciado la variación espacial del desplazamiento. Por lo tanto:

$$u_i = \frac{ZeE_{ext}}{M(\Omega^2 - \omega^2)} \implies \epsilon_{ion} = \frac{E_{ext}}{E_{ext} + E_{ion}} = 1 - \frac{\Omega^2}{\omega^2}$$

Notar que en el caso de los iones la dependencia con la frecuencia es más importante que la dependencia en q ya que, debido a su gran masa, se puede despreciar el desfase espacial entre la perturbación externa y el desplazamiento. De esta forma se obtiene:

$$\varepsilon = \varepsilon_{el} + \varepsilon_{ion} - 1 = \left(1 + \frac{q_0^2}{q^2}\right) \left(1 - \frac{\omega_q^2}{\omega^2}\right)$$

De esta manera la interacción coulombiana apantallada por iones y electrones resulta:

$$V(\omega, q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + q_0^2} \left[1 + \frac{\omega_q^2}{\omega^2 - \omega_q^2}\right]$$

que tiene la forma que habíamos predicho la clase anterior. Para finalizar les propongo el siguiente problema (**problema nro. 7**):

Un parámetro fundamental en la teoría microscópica es el producto $n(\epsilon_F)V_0$, donde $n(\epsilon_F)$ es la densidad de estados al nivel de Fermi y V_0 es un promedio de la interacción electrón electrón sobre la superficie de Fermi. Tomando V_0 como la parte atractiva de la interacción efectiva en el jellium a $\omega = 0$, estimar $n(\epsilon_F)V_0$ para distintos metales simples (*Al*, *Sn*, *Au*, *Ag*, etc).

3.3. El par de Cooper

Hemos visto un posible origen para la interacción atractiva entre electrones. El siguiente paso hacia una descripción microscópica de la superconductividad consiste en determinar en qué circunstancias esta interacción puede dar lugar a algún tipo de apareamiento entre electrones.

Desde un punto de vista más formal, nuestro problema ahora consiste en determinar el estado fundamental y los estados excitados de un Hamiltoniano del tipo:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k, k', \sigma, \sigma', q} v_{kk'q} c_{k-q\sigma}^\dagger c_{k'+q\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'} c_{k\sigma} \quad (3.1)$$

donde

$$v_{kk'q} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + q_0^2} \left[1 + \frac{\omega_q^2}{(\epsilon(k) - \epsilon(k-q))^2 - \omega_q^2} \right]$$

Este problema sigue siendo inmanejable para nosotros por lo cual es conveniente comenzar por plantearse un problema más simplificado. El problema que se planteó Cooper hacia el año 1956 consistía en considerar que sólo un *par* de todos los electrones puede interactuar con un potencial atractivo, dependiendo de su impulso y su energía, mientras que el resto de los electrones permanece en su estado de partícula independiente, es decir, llenando el mar de Fermi hasta E_F . Si referimos ϵ_k a E_F , esto quiere decir que los estados $|k\rangle$ con $\epsilon_k < 0$ estarán ocupados mientras que los estados con $\epsilon_k > 0$ están disponibles para nuestro par.

Cabe señalar que este problema no es completamente consistente porque nada impide que los electrones del mar de Fermi sean dispersados hacia los estados vacíos. Sin embargo, esta restricción hace que sea posible resolver el problema y, como veremos, permite sacar conclusiones muy importantes sobre el verdadero estado fundamental del problema.

Por el momento supondremos que en el término en $v_{kk'q}$ no aparece ningún estado por debajo de k_F (es decir que $v_{kk'q} = 0$ cuando ϵ_k ó $\epsilon_{k'}$ ó ϵ_{k-q} ó $\epsilon_{k'+q}$ son negativos) con lo cual podemos ocupar todos los estados con $\epsilon_k < 0$ olvidándonos de la interacción y concentrarnos en nuestros 2 electrones adicionales.

¿Cuáles son los estados posibles para este par de electrones? La función de onda del par debe tener la forma:

$$\psi(r_1, r_2) = \sum_{k_1, k_2 / \epsilon_{k_1}, \epsilon_{k_2} < 0} A_{k_1, k_2} e^{ik_1 r_1} e^{ik_2 r_2} \text{ (espín)}$$

Como el sistema tiene invariancia traslacional los estados del par se pueden clasificar por el impulso del centro de masa $k_1 + k_2 = K$ (es decir, K es un buen número cuántico). Pasando al sistema de coordenadas relativa y del centro de masa tenemos:

$$\psi_K = \sum_{k_1 + k_2 = K} A_{k_1, k_2} e^{iKR} e^{i\Delta k\rho} \text{ (espín)}$$

donde $\Delta = (k_1 - k_2)/2$, $R = (r_1 + r_2)/2$ y $\rho = r_1 - r_2$.

¿Para que valor de K será mínima la energía del par? Está claro que $K = 0$ nos minimiza la energía cinética del par. Aunque no sabemos que pasa con la energía de interacción vamos a suponer por ahora que $K = 0$ corresponde al estado fundamental del par. Luego $k_1 = -k_2 = k$.

Por otra parte, para que la función de onda del par sea antisimétrica el espín total del par debe ser cero (estado singlete) porque la parte orbital con $K = 0$ es simétrica. Por tanto el par estará compuesto por los estados $(k\sigma, -k\bar{\sigma})$. En segunda cuantificación el estado se escribe:

$$|\psi\rangle = \sum_{k\sigma, \epsilon_k > 0} a_k c_{k\sigma}^\dagger c_{-k\bar{\sigma}}^\dagger |G\rangle$$

donde $|G\rangle = \prod_{k' \leq k_F, \sigma} c_{k'\sigma}^\dagger |0\rangle$ corresponde al mar de Fermi lleno.

Queremos determinar ahora cuál es la energía del par. Es muy importante darse cuenta que un valor *negativo* en esta energía indica que los electrones del par formarán un estado *ligado*, con lo cual todo el mar de Fermi se volvería inestable ya que la energía baja al agregar dos partículas. Es este caso deberíamos concluir que el estado fundamental del sistema *no puede* ser el mismo que en el caso no-interactuante.

Para simplificar el cálculo de la energía, Cooper propuso simplificar la interacción al máximo tomando:

$$v_{k,-k,q} \begin{cases} -V_0 & \text{si } |\epsilon_k|, |\epsilon_{k-q}| < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

donde ω_D es la frecuencia de Debye que corresponde a un valor típico para las frecuencias de fonones. Esta propuesta se inspira en que la interacción $v_{k,-k,q}$ original se vuelve positiva para $|\epsilon_k - \epsilon_{k-q}| < \hbar\omega_q$ siendo $\hbar\omega_q$ una frecuencia típica de fonones.

Luego, la energía y los coeficientes a_k se determinan a partir de la ecuación:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \implies (E - 2\epsilon_k)a_k = \sum_q v_{k,-k,q}a_{k+q} \quad (3.2)$$

Sin la simplificación propuesta por Cooper, la ecuación (3.2) corresponde a un sistema de ecuaciones acopladas en a_k . Así, en cambio, resulta:

$$\begin{aligned} (E - 2\epsilon_k)a_k &= -V_0 \sum_{0 < \epsilon_{k'} < \hbar\omega_D} a_{k'} \quad \text{si } 0 < \epsilon_k < \hbar\omega_D \\ a_k &= 0 \quad \text{en otro caso} \end{aligned}$$

Sumando esta ecuación sobre todo k se obtiene la siguiente ecuación para determinar E :

$$1 = -V_0 \sum_{0 < \epsilon_k < \hbar\omega_D} \left(\frac{1}{E - 2\epsilon_k} \right)$$

que puede simplificarse transformando la suma en una integral:

$$1 = -V_0 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{\rho(\epsilon)d\epsilon}{E - 2\epsilon}$$

Hay una simplificación adicional posible que repetiremos en muchas ocasiones: ya que el rango de integración es mucho menor que E_F , podemos suponer que en ese rango la densidad de estados es constante $\rho(\epsilon) \approx \rho(0)$. Luego, integrando se obtiene:

$$E = \frac{2\hbar\omega_D}{1 - e^{\left(\frac{2}{V_0\rho_0}\right)}} \quad (3.3)$$

Observaciones importantes:

* $V_0\rho_0 > 0 \implies E < 0$, independientemente de cual sea el valor de V_0 . Esto significa que obtenemos un estado ligado para cualquier valor finito de V_0 !. Por lo tanto el mar de Fermi se vuelve inestable.

- * En el problema de la clase pasada se estimaba $V_0\rho_0$, el cual debe estar en el rango $0,5 - 0,2$ para metales simples. Luego el exponente $2/(V_0\rho_0) \sim 4 - 10$ con lo cual la exponencial se hace mucho mayor que 1 y la energía se puede aproximar por:

$$E \approx -2\hbar\omega_D \exp\left[-\frac{2}{v_0\rho_0}\right]$$

Esta aproximación corresponde a lo que se conoce como límite de *acoplamiento débil*.

- * La expresión $E = f(V_0)$ es no-analítica en $V_0 = 0$. De allí la dificultad en tratar este problema en forma perturbativa.
- * Es posible demostrar que la existencia de un estado ligado para cualquier valor del acoplamiento es una consecuencia del bloqueo que ejercen los electrones del mar de Fermi. Les propongo como problema demostrar que sin esta restricción (es decir, para un par de electrones sin más) no se obtiene un estado ligado para cualquier valor de V_0 .

3.4. Pares de Cooper II

Hay varias cuestiones pendientes de analizar en el problema de Cooper:

- 1) ¿De qué orden es la energía de ligadura de los pares?
- 2) ¿Cuál es la extensión espacial típica del par?
- 3) ¿Cómo se modifica la energía del par cuando el impulso total del par es no nulo?
- 4) ¿Cómo se modifican las soluciones del problema cuando se toma en cuenta la dependencia angular en la interacción?

Comencemos por discutir el punto 1). Utilizando la estimación del problema nro. 7 $V_0\rho_0 \sim 0,2 - 0,5$ y tomando en cuenta que $\hbar\omega_D \approx 3 \times 10^{-2}eV$ (lo que corresponde a $kT_D \approx 300K$), obtenemos $E \sim 10^{-7} - 10^{-4}eV$. Es decir, se requieren del orden de $10^{-7} - 10^{-4}eV$ para *romper* un par. Suponiendo que el estado superconductor es un condensado de pares obtendríamos por tanto temperaturas críticas del orden de $1K$, lo cual se corresponde correctamente con los valores reales.

Para analizar el punto 2) es posible utilizar la solución encontrada la clase anterior para los coeficientes a_k :

$$a_k = -V_0 \frac{\sum a_{k'}}{E - 2\epsilon_k}$$

A partir de aquí se puede demostrar que la amplitud cuadrática media del par está dada por:

$$\sqrt{\langle r^2 \rangle} = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\hbar v_F}{E}$$

(hacerlo como ejercicio). Con esta expresión podemos estimar el tamaño típico del par en 100000 Å.

En cuanto a la relación entre el impulso total del par y su energía, si la interacción no dependiera más que de la distancia uno esperaría encontrar una relación del tipo:

$$E(K) = E_0 + \frac{\hbar^2 K^2}{2M}$$

Sin embargo, en nuestro caso interacción depende del impulso de los componentes del par ya que es sólo no nula y atractiva cuando ambas partículas se encuentran a una distancia (en energía) menor que $\hbar\omega_D$ de la superficie de Fermi. Podemos hacernos una idea de cómo depende la energía de ligadura con el impulso mediante una representación gráfica, como se muestra en la figura 3.2.

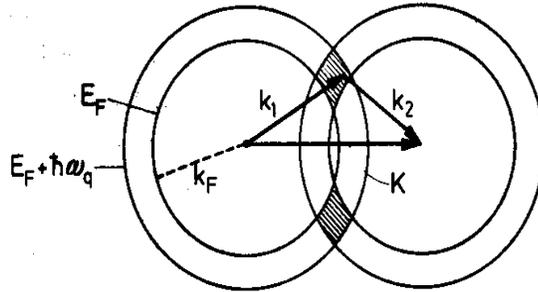


Figura 3.2: Dependencia de la energía del par con el impulso

En esta gráfica vemos que los impulsos de los dos electrones k_1, k_2 deben estar en la región en que se superponen las dos coronas a fin de que la interacción sea finita. Esta intersección es claramente máxima cuando $K = 0$ y se reduce cuando K aumenta. Como problema (**problema nro. 8**) les propongo demostrar que $E(K) \approx E_0 + \hbar v_F K/2$ para valores pequeños de K .

De esta relación se deduce que debe existir un valor máximo de K a partir del cual $E(K) > 0$ y por tanto los pares se disocian.

La solución que hemos obtenido para el problema de Cooper tiene simetría esférica, es decir tiene impulso angular y espín total nulo. Esto es consistente con un potencial de interacción isotrópico como el supuesto por Cooper. De

hecho, podemos demostrar que es imposible encontrar un estado ligado con $S = 1$ (estado triplete) cuando la interacción es isotrópica, ya que en este caso la parte orbital de la función de onda debe ser antisimétrica, es decir, debe ser $a_k = -a_{-k}$.

Para que el estado $S = 1$ sea un estado ligado posible es necesario que la interacción $v_{k,k',q}$ tenga una parte anisotrópica. Por ejemplo de la forma:

$$v_{k,-k,q} = V_0 + V_1 \frac{k \cdot (k - q)}{k|k - q|}$$

Este potencial admite un estado ligado singlete y un estado triplete. La relación entre V_0 y V_1 determina cuál es la más estable. En los superconductores blandos la parte anisotrópica es despreciable. La anisotropía se ha estudiado en relación a la posible coexistencia de ferromagnetismo y superconductividad. También en el caso de los superconductores de alta temperatura crítica se sabe que la anisotropía es muy importante.

Para concluir la discusión del problema de Cooper digamos que este problema, si bien es iluminador, no termina de resolver la cuestión de la superconductividad. Nos sugiere que el estado superconductor puede consistir en un *condensado de pares*. Sin embargo, estos pares tendrían un tamaño enorme (~ 100000 Å) comparado con las distancias medias entre electrones, con lo cual no puede despreciarse el efecto de las correlaciones entre ellos.

Como veremos, la correlación entre pares es fundamental a fin de explicar el origen del *gap* en el espectro de excitaciones del superconductor. El problema de un único par no tiene un *gap* porque sus excitaciones de más baja energía corresponden a excitar una par electrón-hueco sobre el mar de Fermi. Nos queda entonces el problema de demostrar la existencia del *gap* a partir de un modelo microscópico.

Capítulo 4

Teoría BCS a temperatura cero

Vamos a discutir el modelo microscópico y su solución aproximada propuestos por Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) en el año 1957 para describir el estado superconductor. La hipótesis básica de este modelo es que sólo existe una interacción atractiva entre pares de electrones con impulsos y espines opuestos $(k\sigma, -k\bar{\sigma})$ que se encuentran próximos a la superficie de Fermi. La interacción de un par $(k\sigma, -k\bar{\sigma})$ da lugar a otro par $(k'\sigma, -k'\bar{\sigma})$. El Hamiltoniano modelo propuesto por BCS adopta entonces la forma:

$$H^{BCS} = \sum_{k\sigma} \epsilon(k) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k,k',\sigma} v_{kk'} c_{k'\sigma}^\dagger c_{-k'\bar{\sigma}}^\dagger c_{-k\bar{\sigma}} c_{k\sigma} \quad (4.1)$$

donde:

$$v_{kk'} \begin{cases} -V_0 & |\epsilon(k)|, |\epsilon(k')| \leq \hbar\omega_D \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

La primera pregunta es, naturalmente, ¿Cuál es el estado fundamental de este problema? Notemos, en primer lugar, que el estado fundamental debe, necesariamente, tener la propiedad de simetría $n_{k\sigma} = n_{-k\bar{\sigma}}$, es decir que la ocupación del estado $k\sigma$ sea la misma que la del estado $-k\bar{\sigma}$. Por tanto, los operadores número de ocupación, restringidos al subespacio generado por el estado fundamental, deben tener las siguientes propiedades:

$$n_{k\sigma} = n_{k\sigma} n_{k\sigma} = n_{k\sigma} n_{-k\bar{\sigma}} \implies n_{k\sigma} + n_{-k\bar{\sigma}} = 2n_{k\sigma} n_{k\sigma} = 2c_{k'\sigma}^\dagger c_{-k'\bar{\sigma}}^\dagger c_{-k\bar{\sigma}} c_{k\sigma}$$

Estas propiedades nos sugieren definir los operadores $b_k = c_{-k\bar{\sigma}} c_{k\sigma}$ y $b_{k'}^\dagger = c_{k'\sigma}^\dagger c_{-k'\bar{\sigma}}^\dagger$, que crean y destruyen *pares*. De esta forma $n_{k\sigma} + n_{-k\bar{\sigma}} = 2b_k^\dagger b_k$ y H^{BCS} se puede escribir como:

$$H^{BCS} = 2 \sum_k \epsilon(k) b_k^\dagger b_k + \sum_{k,k'} v_{kk'} b_{k'}^\dagger b_k$$

Esta expresión es una forma cuadrática en los b_k y por tanto debe poder diagonalizarse por una simple transformación canónica. Es decir, los autoestados serán de la forma $\psi_n = \sum_k a_{nk} b_k$.

Sin embargo la cosa no es tan fácil porque no sabemos cuál es la estadística para estos estados de pares, es decir, no sabemos si son bosones o fermiones y por lo tanto no sabemos como ocupar los estados de pares para obtener el estado fundamental del sistema. De hecho, las reglas de conmutación de los operadores b_k son las siguientes:

$$[b_k, b_{k'}] = [b_k^\dagger, b_{k'}^\dagger] = 0 \quad [b_k, b_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'} [1 - 2b_k^\dagger b_k]$$

(La demostración queda como ejercicio). Es decir, los b_k no se comportan como bosones por culpa del término $2b_k^\dagger b_k$ en el conmutador entre b_k y b_k^\dagger . Esto es lo que nos impide encontrar el estado fundamental de H^{BCS} mediante una simple transformación canónica.

Vamos a intentar resolver el problema mediante un método variacional. Como función de onda de prueba es natural proponer un producto directo de estados de pares. Así, la función de onda para N electrones sería de la forma:

$$\Phi_N(r_1, r_2, \dots, r_N) = \hat{A}\Phi(r_1, r_2)\Phi(r_3, r_4)\dots\Phi(r_{N-1}, r_N)$$

donde \hat{A} es un operador que genera todas las permutaciones de los subíndices, de manera de antisimetrizar la función de onda total y $\Phi(r_1, r_2)$ es la función de onda de un par con impulso neto cero. En segunda cuantización tenemos:

$$|\Phi\rangle = \sum_k a_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger |0\rangle = \sum_k a_k b_k^\dagger |0\rangle$$

Luego,

$$|\Phi_N\rangle = \sum_{k_1} \dots \sum_{k_{\frac{N}{2}}} \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} a_{k_i} b_{k_i}^\dagger |0\rangle$$

Es importante destacar la diferencia entre este estado y el que corresponde al mar de Fermi lleno del caso no interactuante. En ese caso teníamos $a_{k_i} = 1$ si $k_i < k_F$ y $a_{k_i} = 0$ si $k_i > k_F$, mientras que en esta función de prueba estamos permitiendo que los a_k tomen cualquier valor.

Una cuestión que puede preocuparnos es que ocurre cuando N es impar. En este caso nos quedará un electrón desapareado. Sin embargo, como nos vamos a interesar por el límite termodinámico en el que $N \sim 10^{23}$ su efecto en la energía total puede considerarse despreciable.

Asimismo cabe señalar la dificultad que tiene trabajar con un número de partículas fijo. Para convencerse de ello sólo tienen que intentar calcular la energía E como $\langle \Phi_N | H^{BCS} | \Phi_N \rangle$ y derivar con respecto a los a_k a fin de minimizar. Por esta razón se suele utilizar una descripción *gran canónica* del estado superconductor en la que el número de partículas no está fijo. La función de onda gran canónica se genera superponiendo estados $|\Phi_N\rangle$ con todos los valores posibles de N . Llamaremos a esta función $\tilde{\Phi}$. Se puede ver que $\tilde{\Phi}$ está dada por:

$$\begin{aligned}
|\tilde{\Phi}\rangle &= c \prod_k (1 + a_k b_k^\dagger) |0\rangle \\
&= c \left\{ |0\rangle + \sum_k a_k b_k^\dagger |0\rangle + \sum_{kk'} a_k a_{k'} b_k^\dagger b_{k'}^\dagger |0\rangle + \dots \right\} \quad (4.2)
\end{aligned}$$

donde c es una constante de normalización. Podemos simplificar esta expresión en la forma:

$$|\tilde{\Phi}\rangle = \sum_N \lambda_N |\Phi_N\rangle$$

donde se impone la condición de normalización $\sum_N |\lambda_N|^2 = 1$ y $\langle \Phi_N | \Phi_N \rangle = 1$.

Antes de comenzar a utilizar esta formulación gran canónica es instructivo averiguar cuál es el valor medio de N y su dispersión en un estado genérico $\tilde{\Phi}$. Para operar con el estado $\tilde{\Phi}$ es conveniente escribirlo en la forma:

$$|\tilde{\Phi}\rangle = \prod_k (u_k + v_k b_k^\dagger) |0\rangle$$

con la condición de normalización $u_k^2 + v_k^2 = 1$. Es fácil demostrar luego que:

$$\langle N \rangle = \langle \tilde{\Phi} | N | \tilde{\Phi} \rangle = 2 \sum_k v_k^2 \quad \text{y} \quad \sigma_N^2 = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = 4 \sum_k u_k^2 v_k^2$$

(queda como ejercicio). Si bien el valor absoluto de estas cantidades dependerá de los coeficientes u_k y v_k , podemos ver que $\langle N \rangle \sim \Omega$ y $\sigma_N \sim \sqrt{\Omega}$, donde Ω es el volumen del sistema. Obtenemos entonces lo que era de esperar para el límite termodinámico, es decir que $\sigma_N / \langle N \rangle \rightarrow 0$.

Vamos a proceder ahora a calcular la energía en el estado $\tilde{\Phi}$ para luego proceder a su minimización. Como estamos en un ensamble gran canónico la cantidad a minimizar no es E sino $E - \mu N$. Luego, tomando en cuenta que $H^{BCS} = \sum_{k\sigma} \epsilon(k) n_{k\sigma} + H^{int}$ se obtiene:

$$E - \mu N = 2 \sum_k (\epsilon(k) - \mu) v_k^2 + \langle \tilde{\Phi} | H^{int} | \tilde{\Phi} \rangle$$

donde el factor 2 del primer término toma en cuenta los dos posibles estados del espín. Para calcular el segundo término es útil descomponer el estado $\tilde{\Phi}$ en la forma:

$$|\tilde{\Phi}\rangle = u_k |\Phi_{k(0)}\rangle + v_k |\Phi_{k(1)}\rangle$$

donde $\Phi_{k(0)}$ corresponde a la parte de $\tilde{\Phi}$ en la que el par $(k \uparrow, -k \downarrow)$ está vacío, mientras que $\Phi_{k(1)}$ corresponde a la parte de $\tilde{\Phi}$ en la que este par está ocupado. De la misma manera se puede descomponer de forma de explicitar la ocupación de un par de pares:

$$|\tilde{\Phi}\rangle = u_k u_{k'} |\Phi_{k(0)k'(0)}\rangle + u_k v_{k'} |\Phi_{k(0)k'(1)}\rangle + v_k u_{k'} |\Phi_{k(1)k'(0)}\rangle + v_k v_{k'} |\Phi_{k(1)k'(1)}\rangle$$

Resulta entonces fácil ver que:

$$\langle \tilde{\Phi} | H^{int} | \tilde{\Phi} \rangle = \sum_{kk'} u_k v_{k'} v_k u_{k'} \langle \Phi_{k(0)k'(1)} | H^{int} | \Phi_{k(1)k'(0)} \rangle = \sum_{kk'} V_{kk'} u_k v_{k'} v_k u_{k'}$$

Por lo tanto, la cantidad que hay que minimizar es:

$$E - \mu N = 2 \sum_k (\epsilon(k) - \mu) v_k^2 + \sum_{kk'} V_{kk'} u_k v_{k'} v_k u_{k'} \quad (4.3)$$

siendo los coeficientes u_k, v_k las cantidades a determinar. Tomando en cuenta la condición de normalización podemos limitarnos a una sola cantidad θ_k tal que $u_k = \text{sen}\theta_k$ y $v_k = \text{cos}\theta_k$. Luego

$$\begin{aligned} E - \mu N &= 2 \sum_k (\epsilon(k) - \mu) \text{cos}^2 \theta_k + \frac{1}{4} \sum_{kk'} V_{kk'} \text{sen} 2\theta_k \text{sen} 2\theta_{k'} \\ \implies \frac{\partial(E - \mu N)}{\partial \theta_k} &= -2(\epsilon(k) - \mu) \text{sin} 2\theta_k + \frac{1}{2} \left(\sum_{k'} V_{kk'} \text{sen} 2\theta_{k'} \right) \text{cos} 2\theta_k \end{aligned}$$

Si definimos al factor entre paréntesis en el segundo término como $-2\Delta_k$, se obtiene una expresión muy simple para θ_k :

$$\tan 2\theta_k = -\frac{\Delta_k}{\epsilon(k) - \mu} \implies \begin{cases} \text{sen} 2\theta_k = 2u_k v_k = \frac{\Delta_k}{\sqrt{(\epsilon(k) - \mu)^2 + \Delta_k^2}} \\ \text{cos} 2\theta_k = v_k^2 - u_k^2 = -\frac{(\epsilon(k) - \mu)}{\sqrt{(\epsilon(k) - \mu)^2 + \Delta_k^2}} \end{cases}$$

La elección del signo implica que $v_k^2 < u_k^2$ para $\epsilon(k) > \mu$, con lo cual $v_k^2 \rightarrow 0$ para $k \rightarrow \infty$ y $N = 2 \sum_k v_k^2$ converge.

La última parte de esta solución variacional consiste en determinar el parámetro Δ_k . De acuerdo a su definición tenemos:

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{(\epsilon(k') - \mu)^2 + \Delta_{k'}^2}} \quad (4.4)$$

Esta ecuación permite determinar Δ_k en forma autoconsistente. Evidentemente esta ecuación admite $\Delta_k = 0$ como solución trivial. Esta es la solución que corresponde al estado normal, ya que $\Delta_k = 0 \implies u_k v_k = 0$ y $v_k^2 - u_k^2 = -(\epsilon(k) - \mu)/|\epsilon(k) - \mu|$, que corresponde a:

$$v_k^2 = 1 \quad u_k^2 = 0 \quad \text{si } k < k_F$$

$$v_k^2 = 0 \quad u_k^2 = 1 \quad \text{si } k > k_F$$

Busquemos ahora una solución no-trivial. Notemos, en primer lugar, que dada la forma de la interacción $V_{kk'}$ se tiene $\Delta_k = \Delta$ si $|\epsilon(k)| < \hbar\omega_D$ y $\Delta_k = 0$ en otro caso. Como una buena aproximación podemos suponer $\mu = 0$, es decir μ no cambia al pasar al estado superconductor. Por otra parte podemos transformar la suma en k' en una integral en energías introduciendo la densidad de estados, con lo cual resulta:

$$\Delta = \frac{V_0}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{\Delta\rho(\epsilon)d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \approx \rho(0)V_0\Delta \operatorname{arc\,senh} \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \right)$$

$$\Rightarrow \Delta = \frac{\hbar\omega_D}{\operatorname{senh} \left(\frac{1}{\rho(0)V_0} \right)}$$

En el límite de acoplamiento débil, es decir $\rho(0)V_0 \ll 1$, la ecuación para Δ puede escribirse como:

$$\Delta = 2\hbar\omega_D \exp \left(\frac{-1}{\rho(0)V_0} \right)$$

4.1. Algunas propiedades de la solución BCS

Las propiedades de la solución variacional están contenidas en los coeficientes u_k, v_k . Si definimos $E_k = \sqrt{\epsilon(k)^2 + \Delta^2}$ tenemos:

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\epsilon(k)}{E_k} \right], \quad u_k^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\epsilon(k)}{E_k} \right]$$

La forma de estos coeficientes como función de $\epsilon(k)$ se muestra en la figura 4.1. Como puede observarse, sólo en una pequeña región, de ancho $2\hbar\omega_D$ alrededor del nivel de Fermi, se tiene $v_k u_k \neq 0$. Esta es la principal diferencia con el estado normal. Mientras que en el estado normal tenemos *electrones* debajo del nivel de Fermi y *huecos* por encima, en este nuevo estado aparece esta pequeña región en que ambos coexisten.

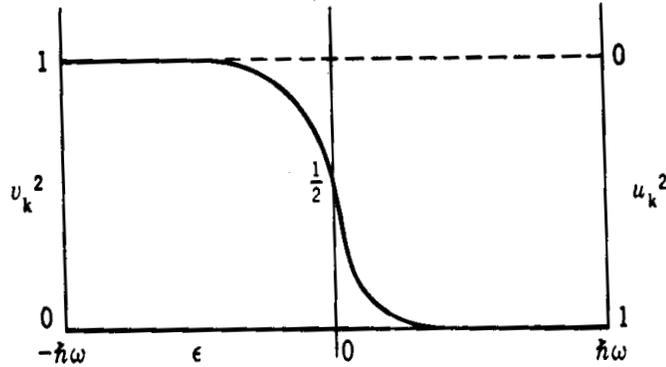


Figura 4.1: Coeficientes v_k^2 y u_k^2 en el estado superconductor

Es instructivo encontrar el valor de E en el nuevo estado y compararlo con su valor en el estado normal. De acuerdo a la expresión (4.3) se tiene:

$$E_s = \sum_k \epsilon(k) \left(1 - \frac{\epsilon(k)}{E_k}\right) - \sum_k \frac{\Delta_k^2}{2E_k}$$

mientras que en el estado normal es:

$$E_N = 2 \sum_{k < k_F} \epsilon(k)$$

Es fácil demostrar, por tanto, que:

$$E_N - E_S \approx \frac{1}{2} \rho(0) \Delta^2$$

(demostrar esto como ejercicio).

Para hacernos una idea del orden de magnitud de esta diferencia, notemos que $\Delta \sim k_B T_c \sim 10^{-3} - 10^{-4} eV$ y $\rho(0) \sim 1/(eV \cdot at)$, con lo cual se tiene $E_N - E_S \sim 10^{-6} eV/at$. Esta magnitud es tan pequeña que resulta razonable dudar de que podamos determinarla con precisión, ya que no conocemos E_N y E_S con tanta precisión. Un argumento a favor de que esto sea posible es que estamos determinando ambas magnitudes utilizando el mismo modelo y, por tanto, los errores que cometemos en ambas se cancelarán.

Otra propiedad interesante de la solución BCS es su *degeneración*. Notemos que no hay ninguna razón para no permitir que los coeficientes v_k, u_k sean complejos. En ese caso, la expresión de la energía (4.3), se escribirá:

$$E = 2 \sum_k \epsilon(k) |v_k|^2 + \sum_{kk'} V_{kk'} u_k^* v_k^* u_{k'} v_{k'}$$

y, por lo tanto, el valor de la energía no cambia si multiplicamos los coeficientes por un factor de *fase*.

Para analizar las consecuencias de esta propiedad supongamos que en la solución encontrada hacemos el cambio $v_k \rightarrow v_k e^{i\varphi}$. El estado $\tilde{\Phi}$ pasa entonces al estado $\tilde{\Phi}_\varphi$, dado por:

$$|\tilde{\Phi}_\varphi \rangle = \prod_k \left(u_k + v_k e^{i\varphi} b_k^\dagger \right) |0 \rangle$$

Notar que no se trata de un simple factor de fase global. Se trata de una auténtica degeneración, que es consecuencia de la indefinición que tenemos en el número de partículas. De hecho, la fase φ se comporta como una variable canónica conjugada de N , de tal forma que si una está bien definida la otra tendrá una dispersión infinita. Les propongo, como ejercicio, demostrar que:

$$|\Phi_N \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{iN\varphi/2} |\tilde{\Phi}_\varphi \rangle$$

Así, como en toda transformación de Fourier tenemos una relación de incerteza $\sigma_N \sigma_\varphi \approx 1$.

¿Cuál es el significado físico de esta fase?

En un superconductor aislado en el cuál N permanece constante φ carece de sentido físico (es sólo un artificio matemático). Sin embargo, cuando dos superconductores distintos se acoplan débilmente a través de una capa de óxido, de tal forma que electrones pueden pasar de uno a otro por efecto túnel, el número de electrones en cada superconductor por separado está indefinido y la fase adquiere un papel fundamental. De hecho, se puede establecer una corriente entre ambos superconductores sin aplicar un voltaje, sólo debido a la diferencia de fase entre ambos. Discutiremos más adelante este fenómeno, conocido como *efecto Josephson*.

4.2. Estados excitados en la teoría BCS

A fin de analizar las propiedades, tanto de transporte como termodinámicas, de este nuevo estado es necesario conocer su espectro de excitaciones. Ahora bien, de la misma forma que no es posible obtener el estado fundamental exacto de H^{BCS} (recordemos que $\tilde{\Phi}$ es una solución variacional aproximada que funciona mejor en cuanto más débil sea la interacción) no nos será posible obtener los estados excitados exactos. Para hacernos una idea de los mismos vamos a confiar un poco en nuestra intuición.

Teniendo en cuenta que en $\tilde{\Phi}$ la correlación entre pares de electrones ($k \uparrow, -k \downarrow$) es la que permite reducir la energía, ¿qué estados pueden ser buenos candidatos a ser las excitaciones de más baja energía?

Está claro que se tratará de estados en los que se destruye uno de los miembros de un par de forma que el otro quede desapareado, o bien se crea un electrón en un estado desapareado. Es decir, nuestros candidatos serán de la forma:

$$|\tilde{\Phi}_{p\uparrow}\rangle = \prod_{k \neq p} (u_k + v_k b_k^\dagger) c_{p\uparrow}^\dagger |0\rangle$$

Una primera prueba que deben pasar estos estados es que sean ortogonales al estado fundamental. Es fácil demostrar que los estados $\tilde{\Phi}_{p\uparrow}$ cumplen $\langle \tilde{\Phi} | \tilde{\Phi}_{p\uparrow} \rangle = 0$. Como una propiedad curiosa de $\tilde{\Phi}$ notemos que el estado $\tilde{\Phi}_{p\uparrow}$ se puede obtener aplicando $c_{p\uparrow}^\dagger$ o $c_{-p\downarrow}$ sobre $\tilde{\Phi}$:

$$c_{p\uparrow}^\dagger |\tilde{\Phi}\rangle = u_p |\tilde{\Phi}_{p\uparrow}\rangle, \quad c_{-p\downarrow} |\tilde{\Phi}\rangle = -v_p |\tilde{\Phi}_{p\uparrow}\rangle$$

Como el número de partículas no está definido puedo obtener el mismo estado creando un electrón en $p \uparrow$ o destruyendo su compañero en $-p \downarrow$.

¿Cuál es la energía en el estado $\tilde{\Phi}_{p\uparrow}$? Les dejo como ejercicio demostrar que:

$$E_1 = \langle \tilde{\Phi}_{p\uparrow} | H^{BCS} | \tilde{\Phi}_{p\uparrow} \rangle = E_0 + \sqrt{\epsilon(p)^2 + \Delta_p^2}$$

donde E_0 es la energía del estado fundamental. Por tanto, si tomamos E_0 como referencia, la energía del estado excitado es $E_p = \sqrt{\epsilon(p)^2 + \Delta_p^2}$.

¿Cuál es el valor mínimo de E_p ? notemos que si $p = k_F$ tenemos $\epsilon(p) = 0$ y $E_p = \Delta$, mientras que si $\epsilon(p) = \hbar\omega_D$ resulta $\Delta_p = 0$ y $E_p = |\hbar\omega_D|$. Como $\Delta \ll$

$\hbar\omega_D$ el mínimo corresponde a $p = k_F$. Cómo en el nuevo estado $\Delta \neq 0$ tenemos $E_1 - E_0 > 0$ y por tanto existe un *gap* entre el estado fundamental y el primer excitado. Esta es la principal diferencia con el estado normal y, como vimos en clases anteriores, el requisito fundamental para explicar la fenomenología del estado superconductor.

¿Cómo generalizar esta manera de generar los estados excitados al caso de dos o más electrones desapareados? Podríamos suponer, ingenuamente, que un estado excitado con dos electrones desapareados estará dado por

$$|\tilde{\Phi}_{p\sigma p'\sigma'} \rangle = \prod_{k \neq p, p'} (u_k + v_k b_k^\dagger) c_{p\sigma}^\dagger c_{p'\sigma'}^\dagger |0 \rangle$$

Sin embargo, es fácil ver que este estado *no siempre* es ortogonal al estado fundamental, ya que

$$\langle \tilde{\Phi} | \tilde{\Phi}_{p\sigma p'\sigma'} \rangle = v_p \delta_{p', -p} \delta_{\sigma', -\sigma}$$

Esta dificultad nos sugiere que es necesario desarrollar una manera de generar los estados excitados más rigurosa.

Siguiendo un método propuesto por Bogoliubov, lo que buscamos son unos operadores $\gamma_{k\sigma}^\dagger$ tales que los estados

$$|\tilde{\Phi}_{p_1\sigma_1 \dots p_n\sigma_n} \rangle = \gamma_{p_1\sigma_1}^\dagger \dots \gamma_{p_n\sigma_n}^\dagger |\tilde{\Phi} \rangle$$

formen una base ortogonal del espacio de estados, es decir: que sean ortogonales entre sí y ortogonales al estado $\tilde{\Phi}$ y estén normalizados. Estas condiciones se cumplen si:

- 1) $[\gamma_{p\sigma}, \gamma_{p'\sigma'}^\dagger]_+ = \delta_{p,p'} \delta_{\sigma,\sigma'}$, o sea que satisfacen reglas de conmutación fermiónicas.
- 2) $\gamma_{p\sigma} |\tilde{\Phi} \rangle = 0$, o sea que $\tilde{\Phi}$ es el vacío de las excitaciones.

Los γ 's se pueden construir a partir de estas dos condiciones. Les propongo, como problema (**problema nro. 9**), demostrar que los operadores que cumplen 1) y 2) están determinados por la transformación de Bogoliubov:

$$\gamma_{p\uparrow}^\dagger = u_p c_{p\uparrow}^\dagger - v_p c_{-p\downarrow}, \quad \gamma_{p\downarrow}^\dagger = u_p c_{p\downarrow}^\dagger + v_p c_{-p\uparrow} \quad (4.5)$$

Para completar el problema y familiarizarse con el álgebra de los operadores γ , les propongo lo siguiente:

- * Expresar H^{BCS} en términos de estos nuevos operadores y mostrar que $H^{BCS} = E_0 + H_M + V$, donde

$$H_M = \sum_{k\sigma} E_k \gamma_{k\sigma}^\dagger \gamma_{k\sigma}$$

y V contiene sólo términos de cuatro operadores.

- * Demostrar que $\gamma_{p\uparrow}^\dagger |\tilde{\Phi} \rangle = |\tilde{\Phi}_{p\uparrow} \rangle$.

* El estado con dos excitaciones $|\tilde{\Phi}_{p\sigma p'\sigma'}\rangle = \gamma_{p\sigma}^\dagger \gamma_{p'\sigma'}^\dagger |\tilde{\Phi}\rangle$ es:

$$|\tilde{\Phi}_{p\sigma p'\sigma'}\rangle = \prod_{k \neq p, p'} (u_k + v_k b_k^\dagger) c_{p\sigma}^\dagger c_{p'\sigma'}^\dagger |0\rangle \quad \text{si } p'\sigma' \neq -p\bar{\sigma}$$

$$|\tilde{\Phi}_{p\uparrow -p\downarrow}\rangle = (v_p - u_p b_p^\dagger) \prod_{k \neq p} (u_k + v_k b_k^\dagger) |0\rangle$$

Para finalizar este capítulo notemos que la energía de dos excitaciones no es simplemente la suma de las energías de las excitaciones separadas. El término de cuatro operadores V describe una interacción residual entre las excitaciones, lo cual significa que estas sólo se corresponden con los autoestados del problema en forma aproximada. Así, se suele denominar *cuasi-partículas* a las excitaciones generadas por los operadores γ . Estas tienen una vida media finita ya que existe una interacción entre ellas debido al término V . Cuando el número de cuasi-partículas es pequeño estas se pueden considerar como independientes, pero cuando la fracción de excitaciones en el sistema se vuelve macroscópica esta hipótesis dejará de ser buena. Lo que ocurre es que ya no podemos obtener las excitaciones a partir de los coeficientes u_k, v_k asociados al estado fundamental porque el número de pares que contribuyen al gap $\Delta_k = -\sum_{k'} V_{kk'} u' v_{k'}$ se reduce.

A temperatura finita tendremos un número macroscópico de excitaciones. Vamos a ver que es posible tratar el problema en la misma forma que a $T = 0$ si permitimos que $\Delta = \Delta(T)$.

Capítulo 5

Teoría BCS a temperatura finita

A temperatura finita la cantidad a minimizar ya no es E sino $F = E - TS$. Nuestra aproximación consistirá ahora en tomar las cuasi-partículas generadas por los γ^\dagger 's como los autoestados del problema, permitiendo que $f_{k\sigma} = \langle \gamma_{k\sigma}^\dagger \gamma_{k\sigma} \rangle \neq 0$ (número finito de cuasi-partículas) y permitiendo que los coeficiente u_k, v_k que vinculan los γ 's con los c 's dependan de la temperatura.

El primer paso es expresar F en términos de u_k, v_k y $f_{k\sigma}$. La receta es que si expresamos H^{BCS} en términos de los operadores γ al tomar valor medio sólo sobreviven los términos en que aparecen el *mismo número* de operadores de creación y destrucción para una dada cuasi-partícula. Así, por ejemplo:

$$\langle \gamma_{k\sigma}^\dagger \gamma_{k'\sigma'} \rangle = f_{k\sigma} \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'} \quad \langle \gamma_{k\sigma} \gamma_{k'\sigma'} \rangle = \langle \gamma_{k\sigma}^\dagger \gamma_{k'\sigma'}^\dagger \rangle = 0$$

Tenemos que $H^{BCS} = H_0 + H_{int}$, donde H_0 es la parte de electrones independientes y H_{int} el término de interacción. Utilizando la receta anterior es fácil demostrar que:

$$\langle H_0 \rangle = 2 \sum_k \epsilon(k) [u_k^2 f_k + v_k^2 (1 - f_k)] \quad (5.1)$$

donde hemos utilizado la simetría $f_{k\uparrow} = f_{-k\downarrow} = f_k$. Podemos comprobar que esta expresión tiende a la correspondiente de temperatura cero cuando $f_k \rightarrow 0$.

Por otra parte en $\langle H_{int} \rangle = \sum_{kk'} V_{kk'} \langle b_{k'}^\dagger b_k \rangle$ aparecen sólo términos de cuatro operadores. Ya que todo puede expresarse en términos de los operadores γ que en nuestra aproximación se consideran asociados a partículas independientes, uno puede desacoplar estos productos de cuatro operadores utilizando el *teorema de Wick*. Este teorema nos dice que el producto de cuatro operadores se descompone de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \langle b_{k'}^\dagger b_k \rangle &= \langle c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle = \langle c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle + \\ &\quad \langle c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} \rangle \langle c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} \rangle - \langle c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow} \rangle \langle c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} \rangle \end{aligned}$$

Esta descomposición puede demostrarse expresando los operadores c en términos de los γ y utilizando luego la receta. Los últimos dos términos se denominan

términos de *Hartree* e *intercambio* y aparecen tanto en el estado normal como en el superconductor. Es por esto que podemos olvidarnos de ellos si lo que queremos es determinar la diferencia en energía entre estos dos estados. Además estos dos términos varían muy poco con la temperatura. Resulta entonces:

$$\begin{aligned} \langle b_{k'}^\dagger b_k \rangle &\approx \langle b_{k'}^\dagger \rangle \langle b_k \rangle = u_{k'} v_{k'} u_k v_k (1 - 2f_{k'}) (1 - 2f_k) \\ \implies \langle H_{int} \rangle &\approx \sum_{kk'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} u_k v_k (1 - 2f_{k'}) (1 - 2f_k) \end{aligned} \quad (5.2)$$

Nuevamente se recupera el resultado de temperatura cero cuando $f_k \rightarrow 0$.

Nos resta determinar el término correspondiente a la entropía. Para esto utilizamos la fórmula de Shanon $S = -k_B \sum_l P_l \ln P_l$, donde P_l es la probabilidad de una determinada configuración. Como los estados generados por los γ corresponden a un sistema de fermiones independientes se puede ver que:

$$S = -2k_B \sum_k [f_k \ln f_k + (1 - f_k) \ln(1 - f_k)] \quad (5.3)$$

Las ecuaciones (5.1), (5.2) y (5.3) nos determinan el funcional a minimizar. En este caso, la condición de mínimo es:

$$\frac{\partial F}{\partial u_k} = \frac{\partial F}{\partial v_k} = \frac{\partial F}{\partial f_k} = 0$$

donde nuevamente debemos imponer la condición de normalización $u_k^2 + v_k^2 = 1$, que permite expresar estos coeficientes como $u_k = \text{sen} \theta_k$ y $v_k = \text{cos} \theta_k$. De la condición $\frac{\partial F}{\partial \theta_k} = 0$ obtenemos:

$$\epsilon(k) \tan 2\theta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \text{sen} 2\theta_{k'} (1 - 2f_{k'})$$

lo cual sugiere definir el gap dependiente de temperatura como:

$$\Delta_k(T) = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{kk'} \text{sen} 2\theta_{k'} (1 - 2f_{k'}) \quad (5.4)$$

Así, en forma análoga a temperatura cero obtenemos:

$$\tan 2\theta_k = -\frac{\Delta_k}{\epsilon(k)} \implies \begin{cases} \text{sen} 2\theta_k = \frac{\Delta_k}{E_k} = 2u_k v_k \\ \text{cos} 2\theta_k = -\frac{\epsilon(k)}{E_k} = v_k^2 - u_k^2 \end{cases}$$

Vemos que la solución sólo se modifica por la presencia de $f_{k'}$ en la expresión del gap. Para determinar f_k aplicamos la condición $\frac{\partial F}{\partial f_k} = 0$ de donde resulta:

$$f_k = \frac{1}{e^{\beta E_k} + 1}$$

donde $\beta = 1/k_B T$ (demostrarlo como ejercicio). Como era de esperar, las cuasipartículas se distribuyen con la distribución correspondiente a un gas de fermiones no interactuantes. Además, como $E_k = \sqrt{\epsilon(k)^2 + \Delta_k^2} > 0 \forall k$, se ve claramente que $f_k \rightarrow 0$ cuando $T \rightarrow 0$.

Al igual que a temperatura cero, la ecuación (5.4) permite determinar el gap en forma autoconsistente. Utilizando los mismos trucos que a $T = 0$ podemos expresar (5.4) en la forma:

$$\frac{1}{\rho(0)V_0} = \frac{1}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{E} \operatorname{tgh} \left(\frac{E}{2k_B T} \right) \quad (5.5)$$

Esta es una ecuación trascendente que no tiene solución analítica excepto en los casos límites $T \rightarrow 0$ (que ya vimos) y $T \rightarrow T_c$.

Es importante destacar que la ecuación (5.5) necesariamente implica la existencia de una temperatura crítica. Así, para $k_B T \gg \hbar\omega_D$ se tiene

$$\operatorname{tgh}(E/2k_B T) \approx E/2k_B T$$

y por tanto $1/\rho(0)V_0 \approx \hbar\omega_D/2k_B T$, lo cual es absurdo. Debe existir una temperatura T_c por encima de la cual esta ecuación no admite solución no-trivial. Vemos además que si T aumenta Δ debe disminuir a fin de mantener constante el valor de la integral. Entonces, la condición para determinar T_c es $\Delta(T_c) = 0$ y a partir de (5.5) se obtiene:

$$\frac{1}{\rho(0)V_0} = \frac{1}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{|\epsilon|} \operatorname{tgh} \left(\frac{|\epsilon|}{2k_B T_c} \right)$$

En el límite de acoplamiento débil esta integral se puede aproximar por:

$$\frac{1}{\rho(0)V_0} \approx \ln \left(\frac{\hbar\omega_D}{k_B T_c} \right) - \int_0^\infty dx \ln x \frac{d}{dx} \left(\operatorname{tgh} \frac{x}{2} \right)$$

siendo la integral en el segundo término igual a $\ln 2e^\gamma/\pi$, donde $\gamma = 0,57721\dots$ es la constante de Euler. Resulta entonces

$$k_B T_c = 1,13 \hbar\omega_D \exp \left(-\frac{1}{\rho(0)V_0} \right) \quad (5.6)$$

Observaciones:

- * como $\hbar\omega_D \sim 1/\sqrt{M}$, donde M es la masa de los iones, esta ecuación predice que $T_c \sim 1/\sqrt{M}$, lo cual está de acuerdo con la experiencia (efecto isotópico).
- * como $\Delta(0) = 2\hbar\omega_D \exp(-1/\rho(0)V_0)$ se encuentra que $2\Delta(0)/k_B T_c = 3,53$ es un valor universal independiente del material. De hecho, en superconductores tradicionales, se confirma que este cociente está entre 3 y 4.5.

¿Hasta que punto es posible predecir el valor de T_c para un dado material a partir de la ecuación (5.6)? La dificultad está en conocer el factor de acoplamiento $\rho(0)V_0$ con suficiente precisión. De acuerdo a estimaciones discutidas en clases anteriores sabemos que $\rho(0)V_0 \sim 0,2 - 0,4$ para metales como *Al*, *Sn* y *Pb*. Esto indica que $k_B T_c/\hbar\omega_D \sim 0,01 - 0,1$ y tomando $\theta_D \sim 100K$ se obtiene $T_c \sim 1 - 10K$ en buen acuerdo con el orden de magnitud real.

5.0.1. Predicciones de la teoría a temperatura finita

Vamos a analizar algunas de las predicciones que emergen de la teoría microscópica de Bardeen, Cooper y Schrieffer a temperatura finita. Nos concentraremos, en primer lugar, en las predicciones relativas a algunas propiedades termodinámicas. Como vimos la clase anterior, una primera predicción importante es que el cociente $2\Delta(0)/k_B T_c$ debe tomar un valor universal cuyo valor se estima en 3.53. En esta clase discutiremos las predicciones de BCS para la energía libre $F(T)$, el campo crítico $H_c(T)$ y el calor específico $c_s(T)$. Para poder analizarlos necesitamos conocer $\Delta(T)$ que, como vimos, está determinado en forma implícita por la ecuación (5.5) que no tiene solución analítica.

Veremos, sin embargo, que el cociente $\Delta(T)/\Delta(0)$ es, en el límite de acoplamiento débil, una función universal de T/T_c . Para comprobarlo podemos integrar por partes la ecuación (5.5) de donde se obtiene:

$$\frac{1}{\rho(0)V_0} = \operatorname{arcsenh}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta}\right) \operatorname{tgh}\left(\frac{\beta\hbar\omega_D}{2}\right) - \int_0^{\hbar\omega_D} d\epsilon \operatorname{arcsenh}\left(\frac{\epsilon}{\Delta}\right) \frac{\partial}{\partial\epsilon} \operatorname{tgh}\left(\frac{\beta E}{2}\right)$$

Como estamos considerando valores de T pequeños frente a $\hbar\omega_D$ podemos aproximar $\operatorname{tgh}(\beta\hbar\omega_D/2) \approx 1$ y también $\operatorname{arcsenh}(\hbar\omega_D/\Delta) \approx \ln(2\hbar\omega_D/\Delta)$. Adimensionalizando la integral y tomando $\hbar\omega_D/\Delta \rightarrow \infty$ se obtiene entonces

$$\frac{1}{\rho(0)V_0} = \ln\left(\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta}\right) - \int_0^\infty dx \operatorname{arcsenh}(x) \frac{\partial}{\partial x} \operatorname{tgh}\left(\sqrt{1+x^2} \frac{\beta\Delta}{2}\right)$$

Como a $T = 0$ tenemos $1/\rho(0)V_0 = \ln(2\hbar\omega_D/\Delta(0))$ podemos reescribir la ecuación anterior en la forma

$$\ln\left(\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)}\right) = - \int_0^\infty dx \operatorname{arcsenh}(x) \frac{\partial}{\partial x} \operatorname{tgh}\left(\sqrt{1+x^2} \frac{\Delta(T)T_c}{\Delta(0)T} \frac{3,53}{4}\right) \quad (5.7)$$

donde hemos utilizado que $2\Delta(0)/k_B T_c = 3,53$. Esta expresión, si bien no es muy práctica para obtener $\Delta(T)$ en forma explícita, pone de manifiesto que $\Delta(T)/\Delta(0)$ es una función universal de T/T_c en el límite de acoplamiento débil.

A partir de la ecuación (5.7) se puede obtener un desarrollo para $\Delta(T)$ a temperaturas bajas ($T \ll T_c$)

$$\Delta(T) \approx \Delta(0) - (2\pi\Delta(0)k_B T)^{1/2} e^{-\beta\Delta(0)}$$

que muestra que la corrección por temperatura a $\Delta(0)$ es exponencialmente pequeña en este límite. Esto se debe a que el número de cuasi-partículas excitadas va como $e^{-\beta\Delta}$.

En el límite opuesto, $T \rightarrow T_c$ se obtiene

$$\Delta(T) \approx 1,74\Delta(0) \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2} \quad (5.8)$$

Les propongo demostrar esta expresión como ejercicio.

Es interesante notar que, si bien $\Delta(T)$ es continuo en $T = T_c$, su derivada diverge en este punto. La variación de Δ como la raíz de $T_c - T$ es una característica típica de todas las teorías de campo promedio en transiciones de fase.

Esto ocurre también, por ejemplo, con la *magnetización* en sistemas magnéticos. A estas cantidades que caracterizan a la fase de baja temperatura se las denomina *parámetro de orden*. El comportamiento del gap con la temperatura se ilustra en la figura 5.1.

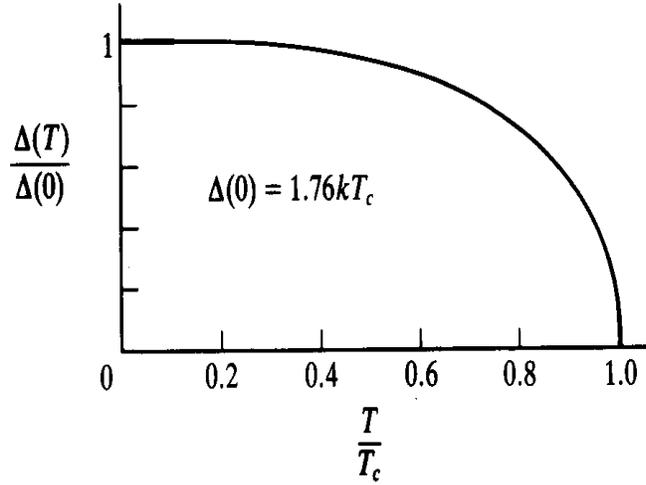


Figura 5.1: Comportamiento del gap con la temperatura

Una vez determinado $\Delta(T)$ todas las propiedades termodinámicas pueden, en principio, determinarse a partir de la teoría microscópica. En general esto requerirá evaluar la energía libre $F_s(T) = E_s - TS$, dada por

$$F_s = 2 \sum_k (\epsilon_k - E_k) f_k + \frac{1}{2} \epsilon_k (1 - 2f_k) - \frac{\epsilon_k^2}{4E_k} (1 - 2f_k) - \frac{E_k}{2} (1 - 2f_k)$$

Para T próxima a T_c , F_s se puede expandir en potencias de Δ , de donde se obtiene (ver libro de Abrikosov)

$$F_s(T) - F_n(T) \approx -\alpha \rho(0) \Delta^4 / (k_B T)^2$$

donde α es una constante numérica. A partir de esta relación y la relación termodinámica

$$F_s(T) - F_n(T) = \frac{H_c^2(T)}{8\pi}$$

uno puede obtener $H_c(T)$. El resultado que predice la teoría BCS para T próxima a T_c es

$$H_c(T) \approx 1.74 H_c(0) \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)$$

Nótese que esta relación difiere de la relación propuesta por la fenomenología que, como vimos en la primera parte del curso, varía en forma cuadrática con T/T_c . Por otra parte, la derivada de $H_c(T)$ en $T = T_c$ que predice esta expresión es finita, lo cual concuerda con la relación termodinámica

$$\frac{H_c}{4\pi} \frac{dH_c}{dT} = S_s - S_n$$

Finalmente, el calor específico puede obtenerse a partir de $c = T \frac{\partial S}{\partial T}$. A partir de la expresión de la entropía (5.3) se obtiene:

$$c_s = 2k_B \beta \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial \beta} \ln \left(\frac{f_k}{1 - f_k} \right)$$

Teniendo en cuenta que $f_k = 1/(1 + \exp \beta E_k)$ esta expresión se reduce a

$$c_s = -2k_B \beta \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial E_k} \left(E_k^2 + \frac{\beta}{2} \frac{\partial E_k^2}{\partial \beta} \right)$$

Por último, notemos que $E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \Delta_k^2}$ depende de T a través de Δ_k , con lo cual podemos escribir el calor específico en la forma

$$c_s = 2k_B \beta \sum_k \left(-\frac{\partial f_k}{\partial E_k} \right) \left(E_k^2 + \frac{\beta}{2} \frac{\partial \Delta_k^2}{\partial \beta} \right) \quad (5.9)$$

Hay varias observaciones importantes acerca de esta expresión:

- * El primer término es el usual para un gas de electrones libres y toma en cuenta la redistribución de las cuasipartículas en los estados próximos al nivel de Fermi cuando la temperatura aumenta.
- * El segundo término toma en cuenta la variación de los niveles de cuasipartícula con la temperatura. No aparece, por tanto, en el estado normal.
- * Cuando $T \ll T_c$ $f_k \sim \exp(-\beta E_k)$ con lo cual se obtiene $c_s \sim \exp(-\beta E_k)$ como era de esperar. La variación completa con temperatura de c_s sólo puede obtenerse en forma numérica.

Detengámonos un momento en analizar el límite $T \rightarrow T_c$. En este límite $\Delta \rightarrow 0$ y podemos reemplazar E_k por $|\epsilon_k|$. El primer término nos da entonces el calor específico electrónico del estado normal:

$$c_n = 2k_B \beta \sum_k \left(-\frac{\partial f_k}{\partial |\epsilon_k|} \right) |\epsilon_k|^2 \approx \gamma T$$

donde $\gamma = 2\pi^2/3\rho(0)k_B^2$. El comportamiento lineal es válido a bajas temperaturas cuando $T \ll E_F$. Esta parte del calor específico no presenta ninguna singularidad en $T = T_c$. En cambio la contribución debida al segundo término presenta una discontinuidad en $T = T_c$ ya que:

$$\left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial \beta} \right)_{T=T_c^+} = 0 \quad \text{y} \quad \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial \beta} \right)_{T=T_c^-} \neq 0$$

Es decir, tenemos una discontinuidad en el calor específico como corresponde a una transición de fase de segundo orden. La derivada para $T = T_c^-$ se puede calcular a través de la expresión (5.8). Esto nos permite evaluar la discontinuidad:

$$\Delta c \approx \rho(0) \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial T} \right)_{T=T_c}$$

Utilizando (5.8) y la expresión de c_n se obtiene

$$\left(\frac{\Delta c}{c_n}\right)_{T_c} \approx 1,43 \quad (5.10)$$

que nos muestra que, dentro de la teoría BCS, esta cantidad es una cantidad universal independiente del material. La experiencia demuestra que la discontinuidad se encuentra muy próxima a 1.4 para metales como *Al*, *Cd* y *Ga*, vale aproximadamente 1.6 para *Sn* y *Ta*, y sube a 2,4 – 2,7 en *Hg* y *Pd*.

Capítulo 6

Aplicaciones de la teoría BCS

En las clases anteriores hemos discutido algunas predicciones de la teoría microscópica para propiedades termodinámicas como la energía libre y el calor específico. Existen, por otra parte, una serie de experimentos en los que se estudia la respuesta del superconductor a perturbaciones externas de distinto tipo. Algunos ejemplos de este tipo de experimentos son:

- * Atenuación de ultrasonido.
- * Relajación del espín nuclear.
- * Absorción de radiación electromagnética.
- * Susceptibilidad magnética.

Todos estos fenómenos tienen en común que pueden describirse mediante un término de interacción de los electrones del sistema con un campo externo (que puede depender del tiempo) de la forma:

$$V(t) = \sum_{k\sigma k'\sigma'} B_{k'\sigma',k,\sigma}(t) c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k\sigma} \quad (6.1)$$

A la lista anterior habría que agregar el caso de las *uniones túnel* en las que se estudia la corriente por efecto túnel entre dos electrodos separados por una capa de óxido. Estos sistemas son de gran interés en el campo de la superconductividad. Como veremos, las uniones túnel también pueden describirse mediante un término de la forma (6.1) que corresponde al acoplamiento entre los estados electrónicos a cada lado de la unión.

La interacción (6.1) no está determinada a menos que conozcamos los coeficientes $B_{k'\sigma',k,\sigma}(t)$. Si bien en general será difícil determinar estos coeficientes en forma microscópica, existen algunas propiedades generales que resultan de argumentos de simetría. Estas propiedades nos van a permitir clasificar a los fenómenos en dos grupos. Veremos también que en el caso superconductor aparecen efectos de *coherencia* (o *interferencia*) que no aparecen en el estado normal.

Para entender esta afirmación notemos que, a primer orden en teoría de perturbaciones, la probabilidad de transición de un estado $k\sigma$ a otro $k'\sigma'$ en el estado normal es proporcional a

$$|B_{k'\sigma',k,\sigma}|^2(1 - f_{k'\sigma'})f_{k\sigma}$$

es decir, no se produce interferencia entre los procesos individuales. En el estado superconductor, en cambio, es necesario primero expresar los operadores $c_{k\sigma}$ en términos de los $\gamma_{k\sigma}$ para poder conocer las ocupaciones de los estados iniciales y finales. Como el mismo operador $\gamma_{k\sigma}$ aparece en los términos en $c_{k\sigma}$ y en $c_{-k\bar{\sigma}}^\dagger$ las probabilidades de transición no serán simplemente proporcionales a $|B_{k'\sigma',k,\sigma}|^2$ si no a combinaciones del tipo $|\alpha B_{k'\sigma',k,\sigma} + \beta B_{-k\bar{\sigma},-k',\bar{\sigma}'}|^2$, es decir, se produce una *interferencia* entre el proceso y su reverso temporal. Esto es debido a que el estado superconductor consiste en una superposición coherente de los estados ocupados de un electrón.

Ahora bien, usualmente los coeficientes $B_{k'\sigma',k,\sigma}$ tienen la siguiente simple propiedad:

$$B_{k'\sigma',k,\sigma} = \pm B_{-k\bar{\sigma},-k',\bar{\sigma}'} \quad (6.2)$$

lo cual nos permite clasificar a los distintos fenómenos en dos grupos:

Llamaremos caso I al caso en que vale el signo + en (6.2). Es el caso de la interacción con un potencial de tipo *escalar*. En este caso la interacción sólo depende del intercambio de impulso pero no depende del sentido de k o σ y por tanto no cambia al cambiar k por $-k$ y σ por $-\sigma$. Por ejemplo, el fenómeno de atenuación de ultrasonido corresponde al caso I ya que la interacción entre electrones se debe a la deformación de la red que puede tratarse como un campo escalar.

El caso II corresponde al signo - en (6.2). Ocurre cuando la interacción es de tipo vectorial, como corresponde, por ejemplo, a la interacción con un campo electromagnético. En este caso la interacción del tipo $\vec{A}\cdot\vec{p}$ da lugar a un término de acoplamiento del tipo:

$$\sum_{k,k',\sigma} \vec{A}_{k-k'}(t)(k+k')c_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$$

que claramente cambia de signo cuando cambiamos k por $-k$ y k' por $-k'$.

También el caso de la relajación de espín nuclear pertenece a esta familia. En este caso la interacción es de la forma $\vec{I}\cdot\vec{S}$, donde \vec{I} es el espín nuclear y \vec{S} es el espín electrónico.

Si bien no conocemos ninguna de estas interacciones en detalle, sabemos que no cambian al pasar del estado normal al superconductor y podemos obtener propiedades generales de las probabilidades de transición según correspondan al caso I o al II.

6.0.2. Cálculo de probabilidades de transición

Como dijimos, en el estado superconductor el cálculo de las probabilidades de transición requiere expresar el acoplamiento (6.1) en términos de los operadores

de Bogoliubov. Se obtienen entonces términos del tipo $\gamma^\dagger\gamma$, $\gamma\gamma$ y $\gamma^\dagger\gamma^\dagger$. Así, por ejemplo tenemos:

$$c_{k'\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} = u_{k'}u_k\gamma_{k'\uparrow}^\dagger\gamma_{k\uparrow} - v_{k'}v_k\gamma_{k\downarrow}^\dagger\gamma_{k'\downarrow} + u_{k'}v_k\gamma_{k'\uparrow}^\dagger\gamma_{k\downarrow}^\dagger + v_{k'}u_k\gamma_{k'\downarrow}\gamma_{k\uparrow}$$

Si asociamos los términos en $k'\sigma'$, $k\sigma$ y en $-k\sigma$, $-k' - \sigma'$ obtenemos:

$$B_{k'\sigma',k\sigma} \left[(u_{k'}u_k \mp v_{k'}v_k) \left(\gamma_{k'\sigma'}^\dagger\gamma_{k\sigma} \pm \Theta_{\sigma'\sigma}\gamma_{-k-\sigma}^\dagger\gamma_{-k'-\sigma'} \right) + (v_k u_{k'} \pm u_k v_{k'}) \left(\gamma_{k'\sigma'}^\dagger\gamma_{-k-\sigma}^\dagger \pm \Theta_{\sigma'\sigma}\gamma_{-k'-\sigma'}\gamma_{k\sigma} \right) \right] \quad (6.3)$$

donde $\Theta_{\sigma'\sigma} = 1$ si $\sigma' = \sigma$ y $\Theta_{\sigma'\sigma} = -1$ si $\sigma' = -\sigma$. De esta expresión vemos que el factor $\Theta_{\sigma'\sigma}$ no afectará a las probabilidades de transición (sólo afecta a la fase relativa entre las distintas amplitudes de transición). Lo que realmente importan son los factores donde aparecen distintas combinaciones de los u_k y v_k , llamados *factores de coherencia*. Estos dependen crucialmente de que la interacción sea de tipo I o II que es lo que determina si vale el signo de arriba o abajo. En las probabilidades de transición el factor $|B_{k'\sigma',k\sigma}|^2$ aparecerá multiplicado por el correspondiente factor de coherencia. Pasaremos ahora a analizar estos factores para cada uno de los distintos tipos de procesos.

Procesos tipo $\gamma^\dagger\gamma$

En este caso los factores de coherencia son del tipo:

$$A_{k,k'} = (u_{k'}u_k \mp v_{k'}v_k)^2$$

donde el signo $-$ corresponde a interacciones de tipo I y el $+$ al tipo II. A partir de los resultados de la teoría BCS es posible escribir estos factores en la forma:

$$\begin{aligned} A_{k,k'} &= \frac{1}{4} \left[\left(1 + \frac{\epsilon_k}{E_k} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{\epsilon_{k'}}{E_{k'}} \right)^{1/2} \mp \left(1 - \frac{\epsilon_k}{E_k} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{\epsilon_{k'}}{E_{k'}} \right)^{1/2} \right]^2 \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_k\epsilon_{k'}}{E_k E_{k'}} \mp \frac{\Delta^2}{E_k E_{k'}} \right) \end{aligned} \quad (6.4)$$

(la comprobación de esta expresión queda como ejercicio). Como E_k es una función par de ϵ_k los términos impares en ϵ_k y $\epsilon_{k'}$ se cancelarán al sumar sobre k y k' . Por lo tanto sólo el primer término y el último son importantes en $A_{k,k'}$. La probabilidad de transición por unidad de tiempo estará dada, de acuerdo a la regla de oro de Fermi, por:

$$P_1 = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k,k'} |B_{k\sigma,k'\sigma'}|^2 A_{k,k'} [f_{k'}(1-f_k) - f_k(1-f_{k'})] \delta(E_k - E_{k'} + \hbar\omega)$$

donde hemos supuesto que la dependencia temporal de la perturbación es una oscilación armónica de frecuencia ω .

Para simplificar esta expresión es válido reemplazar $|B_{k\sigma,k'\sigma'}|^2$ por una constante $\langle |B|^2 \rangle$ que representa el valor medio de la interacción para los estados

alrededor del nivel de Fermi y reemplazar las sumatorias por integrales sobre ϵ . Resulta entonces:

$$P_1 = \frac{2\pi}{\hbar} \langle |B|^2 \rangle \int \rho(\epsilon) d\epsilon \int \rho(\epsilon') d\epsilon' \frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\Delta^2}{EE'} \right) \delta(E - E' + \hbar\omega) (f(E') - f(E))$$

Ahora bien, como el integrando depende exclusivamente de E y E' conviene hacer un cambio de variables, introduciendo la densidad de estados del estado superconductor:

$$\rho_s(E) = \rho(\epsilon) \left| \frac{d\epsilon}{dE} \right| \approx \rho(0) \operatorname{Re} \left(\frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \right) \quad (6.5)$$

donde Re indica parte real.

De esta forma la probabilidad de transición se puede escribir como:

$$P_1 = \alpha \int_{\Delta}^{\infty} dE \int_{\Delta}^{\infty} dE' \frac{(EE' \mp \Delta^2)}{\sqrt{E^2 - \Delta^2} \sqrt{E'^2 - \Delta^2}} [f(E) - f(E')] \delta(E - E' + \hbar\omega)$$

donde $\alpha = 4\pi/\hbar \langle |B|^2 \rangle \rho(0)^2$. Lo que nos interesa en general es la diferencia entre el estado superconductor y el normal. Pero en el caso normal la probabilidad de transición es simplemente $P_n = 2\pi/\hbar \langle |B|^2 \rangle \rho(0)^2 \hbar\omega$, con lo cual el cociente entre P_1 y P_n se vuelve una cantidad universal sólo dependiente de si tenemos una perturbación de tipo I o II.

Procesos tipo $\gamma\gamma$ y $\gamma^\dagger\gamma^\dagger$

En este caso los elementos de matriz llevan asociados un factor de coherencia de la forma

$$A'_{k,k'} = (v_k u_{k'} \pm v_{k'} u_k)^2$$

Análogamente al caso anterior se puede ver fácilmente que:

$$A'_{k,k'} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\Delta^2}{E_k E_{k'}} \right)$$

donde hemos eliminado desde ya los términos impares en ϵ_k y $\epsilon_{k'}$.

Evidentemente, el efecto de los factores de coherencia será máximo cuando $E_k \sim E_{k'} \sim \Delta$. Esto indica que en interacciones de caso I se reduce el peso de procesos del tipo $\gamma^\dagger\gamma$ y aumenta el de procesos del tipo $\gamma\gamma$ y $\gamma^\dagger\gamma^\dagger$, mientras que en interacciones de caso II es al revés. Físicamente los procesos tipo $\gamma^\dagger\gamma$ son procesos de *scattering* de una cuasi-partícula, mientras que los $\gamma\gamma$ y $\gamma^\dagger\gamma^\dagger$ son procesos inelásticos en los que se destruye o crea un par de cuasi-partículas. Notemos también que estos procesos tendrán lugar sólo cuando $\hbar\omega \geq \Delta$.

Por otra parte, vemos que los factores de coherencia en los procesos de creación o destrucción de cuasi-partículas son los mismos que en los procesos de scattering si adoptamos la convención de que una de las cuasi-partículas del par creado o destruido tiene energía E negativa. Les dejo como ejercicio demostrar que, con esta convención, la probabilidad de transición total (sumando todos los procesos) se puede escribir como:

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} \langle |B|^2 \rangle \rho(0)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{(E(E + \hbar\omega) \mp \Delta^2)}{\sqrt{E^2 - \Delta^2} \sqrt{(E + \hbar\omega)^2 - \Delta^2}} [f(E) - f(E + \hbar\omega)] \quad (6.6)$$

Atenuación de ultrasonido

Como indicáramos anteriormente, la atenuación de ultrasonido corresponde al caso I de interacciones simétricas frente a inversión temporal, es decir al signo superior en la expresión (6.6). Notemos también que en una experiencia de este tipo las frecuencias del ultrasonido son típicamente menores que $10^9 Hz$, con lo cual típicamente $\hbar\omega \leq \Delta$ y $\hbar\omega \ll kT$. En estas condiciones es posible describir la experiencia por el límite $\omega \rightarrow 0$ de la expresión (6.6). A fin de independizar el resultado de parámetros desconocidos como $\langle |B|^2 \rangle \rho(0)^2$ dividimos P por el correspondiente valor en el caso normal, i.e $P_n = 2\pi/\hbar \langle |B|^2 \rangle \rho(0)^2 \hbar\omega$, con lo cual se obtiene

$$P/P_n = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{(E(E + \hbar\omega) \mp \Delta^2)}{\sqrt{E^2 - \Delta^2} \sqrt{(E + \hbar\omega)^2 - \Delta^2}} [f(E) - f(E + \hbar\omega)]$$

y tomando el límite $\omega \rightarrow 0$ se reduce a:

$$\begin{aligned} P/P_n &\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) = f(-\infty) - f(-\Delta) + f(\Delta) - f(\infty) \\ &= 2f(\Delta) = \frac{2}{1 + e^{\beta\Delta}} \end{aligned} \quad (6.7)$$

Esta expresión demuestra que en el caso superconductor se produce una atenuación que varía exponencialmente con la temperatura (mientras que en el caso normal es aproximadamente constante). Vemos que, por una parte, $P/P_n \sim \exp(-\beta\Delta)$ cuando $T \rightarrow 0$. Por otra parte, como $\Delta(T) \rightarrow 0$ para $T \rightarrow T_c$ se encuentra que P/P_n cae con pendiente infinita a partir de $T = T_c$. La gráfica de P/P_n frente a la temperatura se muestra en la figura 6.1.

La técnica de atenuación de ultrasonido permite estudiar la anisotropía en el gap Δ_k estudiando la propagación del sonido según distintas direcciones cristalográficas.

Relajación de espín nuclear

El fenómeno de relajación de espín nuclear debido a la interacción hiperfina entre el espín electrónico y el nuclear es un caso típico de acoplamiento tipo II. Este caso corresponde al signo de abajo en la expresión (6.6) que lleva a un comportamiento radicalmente distinto de P como función de T con respecto al caso I visto anteriormente.

Para estudiar la relajación de espín nuclear nuevamente nos basta con analizar el límite $\omega \rightarrow 0$ de las expresiones ya que la frecuencia de precesión del espín nuclear es mucho más pequeña que Δ/\hbar y kT/\hbar . En el límite $\omega \rightarrow 0$ obtenemos

$$P/P_n \rightarrow 2 \int_{\Delta}^{\infty} \frac{E^2 + \Delta^2}{E^2 - \Delta^2} \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE$$

Es fácil ver que esta expresión diverge logarítmicamente debido a la divergencia del integrando en $E = \Delta$. Este tipo de divergencias aparece siempre que tenemos el producto de dos densidades de estados del estado superconductor dentro

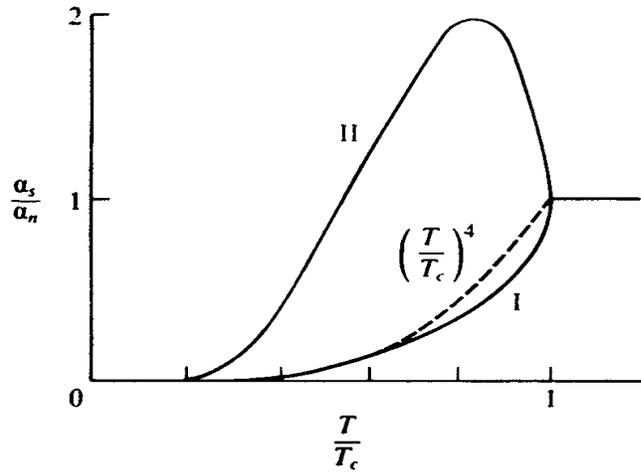


Figura 6.1: Dependencia con temperatura de la probabilidad de transición en fenómenos correspondientes al caso I (atenuación de ultrasonido) y al caso II (relajación de espín nuclear)

de la teoría BCS. En la práctica las divergencias de este tipo se suavizan debido a dos tipos de mecanismos: 1) la presencia de cierta anisotropía en el parámetro de orden (es decir que el gap depende un poco de la dirección) y 2) el decaimiento inelástico de las cuasi-partículas debido a la interacción con fonones. En cualquiera de los dos casos se elimina la divergencia y el comportamiento de P/P_n como función de la temperatura es el que se muestra cualitativamente en la figura 6.1. Lo importante a destacar es que cuando $T \rightarrow T_c$ la probabilidad de transición en el estado superconductor es considerablemente mayor que en el estado normal.

6.0.3. Transporte en uniones túnel

En una unión túnel se tienen dos electrodos metálicos separados por una capa de óxido de unos pocos nanómetros de espesor. Uno o los dos electrodos pueden a su vez ser superconductores. Como veremos, estos sistemas son de gran interés por sus diversas aplicaciones que permiten, por ejemplo:

- * el análisis experimental detallado de la densidad de estados en el estado superconductor.
- * estudiar la variación del gap con la temperatura.
- * estudiar el espectro de fonones.
- * estudiar efectos de coherencia cuántica (efecto Josephson) entre dos superconductores.

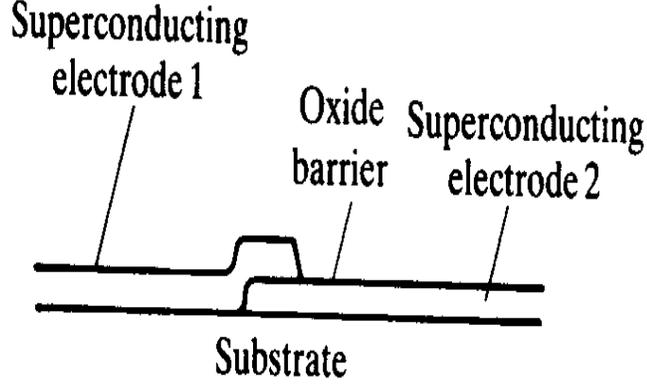


Figura 6.2: Esquema de una unión túnel

El esquema de una unión túnel se representa en la figura 6.2. La capa de óxido constituye una barrera de potencial para los electrones en los electrodos metálicos. Para su descripción microscópica podemos utilizar el siguiente Hamiltoniano:

$$H = H_1 + H_2 + \sum_{k,k',\sigma} \left(T_{kk'} c_{k\sigma}^\dagger d_{k'\sigma} + T_{k'k} d_{k'\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \right)$$

donde H_1 y H_2 corresponden a los dos electrodos desacoplados y los dos últimos términos describen la transferencia de un electrón entre los dos electrodos debido al efecto túnel a través de la barrera. Los operadores $c_{k\sigma}^\dagger$ crean un electrón en el electrodo de la izquierda (electrodo 1) y los $d_{k\sigma}^\dagger$ en el de la derecha (electrodo 2). Los coeficientes $T_{kk'}$ se denominan integrales de salto. Estos pueden tomarse como parámetros fenomenológicos o bien calcularse en forma microscópica a partir de los estados electrónicos en la superficie de cada metal. Es importante señalar que para garantizar la hermiticidad se debe cumplir que $T_{kk'} = T_{k'k}^*$.

Este tipo de modelo fue propuesto originalmente por Bardeen, quien también sugirió la manera de calcular las integrales de salto a partir de la parte evanescente de la función de onda electrónica en el interior de la barrera. La expresión dada por Bardeen es:

$$T_{kk'} = \frac{\hbar^2}{2im} \int ds \left[\phi_k \frac{\partial \chi_{k'}}{\partial z} - \chi_{k'} \frac{\partial \phi_k}{\partial z} \right]$$

donde ϕ_k y χ_k son las funciones de onda en los electrodos 1 y 2 respectivamente. La integral debe tomarse sobre una superficie en el interior de la barrera.

La magnitud que nos interesa analizar es la corriente a través de la unión como función del voltaje aplicado entre los dos electrodos. En el caso en que los dos electrodos se encuentran en el estado normal es muy sencillo calcular la corriente utilizando teoría de perturbaciones a primer orden. Tenemos:

$$P_{1 \rightarrow 2} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{kk'\sigma} |T_{kk'}|^2 f_1(\epsilon_k^1) (1 - f(\epsilon_{k'}^2)) \delta(\epsilon_k^1 - \epsilon_{k'}^2)$$

con lo cual,

$$I = e(P_{1 \rightarrow 2} - P_{2 \rightarrow 1}) = \frac{2e\pi}{\hbar} \sum_{kk'\sigma} |T_{kk'}|^2 (f_1(\epsilon_k^1) - f(\epsilon_{k'}^2)) \delta(\epsilon_k^1 - \epsilon_{k'}^2)$$

Para simplificar esta expresión reemplazamos la sumatoria por una integral sobre energías. Supondremos que, en general, las integrales de salto no dependen fuertemente de la energía en la región de integración. De esta forma se obtiene:

$$I = \frac{2e\pi T^2}{\hbar} \int d\epsilon (f_1(\epsilon) - f_2(\epsilon)) \rho_1(\epsilon - eV/2) \rho_2(\epsilon + eV/2) \quad (6.8)$$

donde también hemos supuesto que el efecto de el voltaje aplicado consiste simplemente en desplazar los niveles de energía del electrodo 1 en la cantidad $eV/2$ hacia arriba y los del electrodo 2 en la misma cantidad hacia abajo (también tenemos $\mu_1 = \mu + eV/2$ y $\mu_2 = \mu - eV/2$). Si el voltaje es pequeño se obtiene un comportamiento ohmico con $I = V/R_n$, siendo R_n la resistencia normal de la unión dada por:

$$R_n^{-1} = \frac{2\pi e^2 T^2}{\hbar} \rho_1(\mu) \rho_2(\mu)$$

caso N-S

Para obtener la corriente cuando uno de los electrodos es superconductor estaríamos tentados de simplemente reemplazar ϵ por E en la ecuación (6.8). ¿Es esto correcto o estamos despreciando factores de coherencia que pueden aparecer como en el caso de los fenómenos que ya estudiamos?

La respuesta es que en el caso normal-superconductor esto es correcto y se puede obtener el resultado (a primer orden en teoría de perturbaciones) simplemente reemplazando ρ_2 por ρ_s (dado por la expresión (6.5)) en (6.8). Les propongo como problema (**problema nro. 10**) demostrar esta propiedad utilizando el procedimiento de la clase anterior, es decir expresando primero el término de acoplo entre los electrodos en términos de los operadores de Bogoliubov y luego calculando las probabilidades de transición. Deben ver que para cada estado k con energía E_k en el superconductor, existe otro estado k' con $\epsilon_{k'} = -\epsilon_k$ que lleva a la misma energía de excitación E_k . La combinación de estos dos estados hace que desaparezcan los factores $|u_k|^2$ y $|v_k|^2$ de la expresión de la corriente.

De esta manera se obtiene:

$$I_{ns} = \frac{2\pi e T^2}{\hbar} \rho_1(0) \int dE (f(E - eV) - f(E)) \rho_S(E)$$

donde estamos considerando que la densidad de estados en el electrodo normal ρ_1 es constante y suponiendo que el potencial químico del superconductor se toma como cero de energías. Esta expresión se puede poner en términos de la resistencia normal:

$$I_{ns} = \frac{1}{eR_n} \int \frac{\rho_s(E)}{\rho_2(0)} (f(E - eV) - f(E))$$

En general, para evaluar esta integral es necesario utilizar métodos numéricos. El comportamiento cualitativo de la corriente en función del voltaje aplicado se muestra en la figura 6.3. Como puede verse, a temperatura cero no fluye corriente a través de la unión cuando el voltaje es menor que Δ . Esto es una manifestación directa de la existencia de un gap para las excitaciones del superconductor. Las uniones túnel constituyen por tanto una herramienta poderosa para comprobar esta predicción fundamental de la teoría BCS.

Para analizar las propiedades de las uniones túnel es conveniente utilizar el esquema llamado *modelo semiconductor*. Este esquema se ilustra también en la figura 6.3: el electrodo normal se representa de la manera usual por una distribución continua de estados de partícula independiente (con una densidad constante $\rho_1(0)$), mientras que el electrodo superconductor se representa como si fuera un *semiconductor* ordinario en donde los estados con energía positiva $E_k > 0$ se encuentran vacíos y los de energía negativa están llenos en el estado fundamental. En este modelo las transiciones que dan lugar a la corriente túnel son transiciones *horizontales*, es decir, ocurren a energía constante una vez que hemos desplazado los potenciales químicos de ambos electrodos de acuerdo al voltaje aplicado eV .

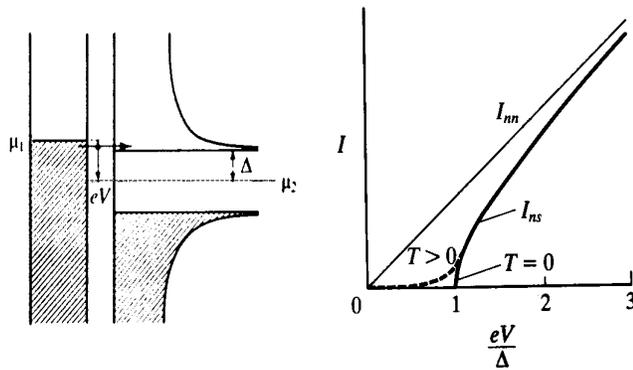


Figura 6.3: Esquema tipo *semiconductor* para analizar la corriente en una unión túnel normal-superconductor. A derecha se muestra la relación IV típica.

Cuando la temperatura es finita existe cierta probabilidad de tener una ocupación no nula en los estados del superconductor por encima del gap. En este caso la corriente es finita aún cuando $eV < \Delta$.

Caso S-S

En el caso en que los dos electrodos son superconductores los argumentos utilizados en el apartado anterior que justifican la desaparición de los factores de coherencia siguen siendo válidos. Esto es así, al menos, si dejamos de lado el *efecto Josephson* por el cual podemos establecer una corriente a través de una unión superconductor sin que se produzca una diferencia de potencial. Vamos a discutir este fenómeno en la próxima clase.

La expresión para la corriente como función del voltaje en el caso S-S está dada por:

$$I_{ss} = \frac{1}{eR_n} \int \frac{\rho_{1s}(E - eV)}{\rho_1(0)} \frac{\rho_{2s}(E)}{\rho_2(0)} (f(E - eV) - f(E))$$

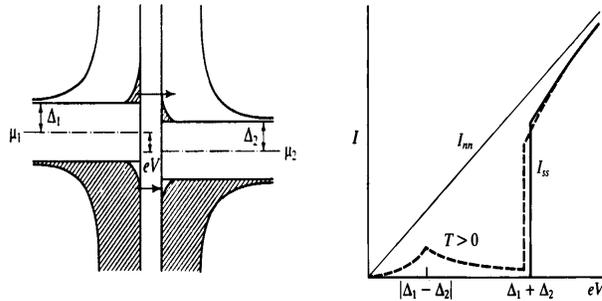


Figura 6.4: Esquema tipo semiconductor para una unión túnel S-S. A derecha se muestra la IV típica para este tipo de uniones.

Nuevamente en este caso hace falta recurrir a métodos numéricos para evaluar la corriente dada por esta expresión. La forma cualitativa para el caso en que los gaps de los electrodos son diferentes (Δ_1 y Δ_2) se muestra en la figura 6.4. Como puede verse, a temperatura cero es necesario que el voltaje supere el valor $\Delta_1 + \Delta_2$ para que fluya corriente. Cuando $T > 0$ la corriente también fluye a voltajes menores que éste debido a la presencia de cuasi-partículas excitadas térmicamente. En este caso podemos ver que la corriente presenta un pico muy marcado en $eV = |\Delta_1 - \Delta_2|$ que coincide con la situación en la que los límites inferiores de las bandas de energía positiva de los dos superconductores están alineados. Estas propiedades se entienden claramente utilizando el esquema semiconductor que se muestra también en la figura 6.4.

6.0.4. El efecto Josephson

Como vimos la clase anterior, transferir un electrón de un electrodo superconductor al otro en una unión túnel requiere, como mínimo una energía $\Delta_1 + \Delta_2$. Es decir, es necesario primero romper un par en el primer electrodo y luego crear un electrón despareado en el segundo. No hemos analizado, sin embargo, la posibilidad de transferir un par de Cooper, como un todo, de un electrodo al otro.

Es decir, hasta ahora hemos considerado a los metales a cada lado de la unión por separado, suponiendo que los estados coherentes que caracterizan a un superconductor se formaban a cada lado de manera independiente. Sin embargo, el acoplamiento pequeño pero finito que existe entre los dos electrodos nos obliga a considerar la posibilidad de formar estados coherentes que involucren a los dos electrodos como un todo. Se puede decir que en una unión túnel entre dos superconductores es posible formar pares de Cooper con electrones que pertencen a electrodos diferentes.

Esta reflexión nos lleva a concluir que es posible transferir pares de Cooper con una probabilidad comparable a la de transferir un único electrón y sin aplicar ningún voltaje. Este es un fenómeno que fue predicho por Josephson hacia 1962.

Para analizar el efecto Josephson en forma microscópica es conveniente utilizar, como punto de partida, una base en la que el número de partículas en cada electrodo está bien definido. Como vimos al analizar la función de onda BCS, estos estados están vinculados a los estados con una fase bien definida a través de la relación:

$$|\Phi_N\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{iN\varphi/2} |\tilde{\Phi}_\varphi\rangle$$

Llamaremos $|\Phi_{N_1}^1\rangle$ y $|\Phi_{N_2}^2\rangle$ a los estados fundamentales en cada electrodo con un número de pares de partículas bien definido. Nuestro sistema estará descrito por un Hamiltoniano $H = H_0 + H_T$, donde $H_0 = H_1 + H_2$ describe a los electrodos desacoplados y H_T es el término de acoplamiento debido al efecto túnel. El estado fundamental de H_0 , $|\Psi_{N_1+N_2}\rangle$, se obtiene como producto directo de $|\Phi_{N_1}^1\rangle$ y $|\Phi_{N_2}^2\rangle$.

Al introducir el acoplamiento debido a H_T encontramos que, si bien el número de total de pares $N = N_1 + N_2$ se conserva (es un buen número cuántico), N_1 y N_2 no se conservan por separado. Podemos, a partir de ahora, identificar a los estados $|\Psi_{N_1+N_2}\rangle$ por un único índice n que representa el número de pares transferidos de 1 a 2, es decir $|\Phi_n\rangle = |\Phi_{N-n}^1\rangle |\Phi_n^2\rangle$.

En ausencia de H_T todos los $|\Phi_n\rangle$ están degenerados, ya que $E_{n+1} - E_n = 2(\mu_2 - \mu_1) = 0$ cuando el voltaje entre los electrodos es cero. H_T rompe la degeneración ya que aparece un acoplamiento efectivo entre $|\Psi_n\rangle$ y $|\Psi_{n+1}\rangle$ a segundo orden en H_T . Este acoplamiento está dado por:

$$J_{n+1,n} = \sum_I \langle \Psi_{n+1} | H_T | I \rangle \frac{1}{E_n - E_I} \langle I | H_T | \Psi_n \rangle$$

donde $|I\rangle$ es un estado intermedio arbitrario en el que se crea un electrón adicional en 2 y un hueco en 1. Como problema (**problema nro. 11**) les porpongo demostrar que:

$$J_{n+1,n} = J_0 = -4 \sum_{kk'} |T_{kk'}|^2 \frac{|u_k v_k u_{k'} v_{k'}|}{E_k + E'_k} \quad (6.9)$$

Teniendo en cuenta este acoplamiento efectivo, el problema efectivo adopta una forma muy sencilla, equivalente a un Hamiltoniano tight-binding de una dimensión con acoplamientos a primeros vecinos, es decir:

$$H|\Phi_n \rangle = E_0|\Phi_n \rangle + J_0(|\Phi_{n+1} \rangle + |\Phi_{n-1} \rangle)$$

Este es un problema que sabemos resolver desde sólido I, no tenemos más que aplicar el teorema de Bloch, ya que se trata de una situación en la que tenemos invariancia “traslacional”. La solución será una función de onda de Bloch, de la forma:

$$|\Phi_\alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i\alpha n} |\Psi_n \rangle$$

¿Cuál es el significado físico de α en el problema de la unión túnel?

Cómo se puede comprobar fácilmente $|\Phi_\alpha \rangle$ es un estado en el que el número de pares transferidos n se encuentra indefinido pero la diferencia de fase entre los dos electrodos está bien definida. Pueden comprobar esto como ejercicio utilizando la expresión que vincula estados BCS con número de partículas bien definido y con fase bien definida. α no es por tanto otra cosa que la diferencia de fase entre los dos superconductores.

Veremos ahora que $|\Phi_\alpha \rangle$ es un estado que conduce corriente y que esta corriente es una función sencilla de α . Para esto es conveniente expresar el operador corriente como:

$$\hat{I} = e \frac{dN}{dt} = \frac{ie}{\hbar} [H, N_2]$$

luego,

$$\langle \hat{I} \rangle = \langle \Psi_\alpha | \hat{I} | \Psi_\alpha \rangle = \frac{-2e}{\hbar} \text{Im} \langle \Psi_\alpha | N_2 H | \Psi_\alpha \rangle$$

Expresando $|\Phi_\alpha \rangle$ en términos de $|\Phi_n \rangle$ resulta:

$$\langle \hat{I} \rangle = -\frac{4e}{\hbar} J_0 \text{sen} \alpha \quad (6.10)$$

Esta es la famosa relación corriente-fase para una unión túnel derivada por Josephson hacia 1962. Su confirmación experimental se produjo al año siguiente. Notemos que el valor máximo de $\langle \hat{I} \rangle$ se produce para $\alpha = \pi/2$ y su valor es $I_c = -4eJ_0/\hbar$. Para estimar el orden de magnitud de I_c es necesario evaluar la expresión (6.9) para el acoplamiento efectivo J_0 . Utilizando las técnicas ya habituales en este curso podemos ver que:

$$I_c \simeq \frac{4}{eR_n} \int dE \int dE' \frac{1}{E+E'} \frac{\Delta_1}{\sqrt{E^2 - \Delta_1^2}} \frac{\Delta_2}{\sqrt{E'^2 - \Delta_2^2}}$$

Esta integral fue evaluada por Ambegaokar y Baratoff hacia 1963, quienes obtuvieron:

$$I_c = \frac{2}{eR_n} \frac{\Delta_1 \Delta_2}{\Delta_1 + \Delta_2} K\left(\frac{|\Delta_1 - \Delta_2|}{\Delta_1 + \Delta_2}\right)$$

donde K indica la integral elíptica de primera especie. En el caso particular en que $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$ se obtiene un resultado muy simple:

$$I_c = \frac{\pi}{2eR_n} \Delta$$

Este valor es el mismo que toma la corriente de cuasi-partículas I_{ss} cuando $\Delta_1 = \Delta_2$ para $eV = 2\Delta$ a temperatura cero. Para un superconductor tradicional con un valor del gap del orden de $10^{-3}eV$ y una unión túnel con resistividad normal del orden de $0.1 \Omega mm^2$ se obtiene una corriente Josephson máxima del orden de $1 A/cm^2$. Si la resistividad es mayor que este valor el efecto Josephson se ve eclipsado por las fluctuaciones térmicas (que son proporcionales a $R_n k_B T$).

Capítulo 7

Temas avanzados: La ecuación de Bogoluibov-de Gennes

La teoría BCS se basa en la hipótesis de que los estados electrónicos pueden describirse correctamente como ondas planas con un vector de onda k bien definido. Es decir, BCS tiene por objeto analizar las propiedades de *volumen* del estado superconductor en un sistema ideal que posee simetría de traslación espacial. Sin embargo, en muchas situaciones de interés práctico nos interesa analizar sistemas que, o bien no son espacialmente homogéneos, o bien se trata de sistemas desordenados en los que k no es un buen número cuántico. La inhomogeneidad espacial puede deberse a que las propiedades del material varían en el espacio o bien a que existen campos externos aplicados que pueden variar en el espacio y en el tiempo. Ejemplos característicos de esta situación son las uniones túnel que analizamos en el capítulo anterior. En aquel caso hemos podido atacar el problema en base a la teoría BCS gracias a que el acoplamiento entre los electrodos es muy pequeño y puede tratarse en forma perturbativa. No podríamos, sin embargo, analizar de esta forma una situación en la que los electrodos se encuentran en contacto directo (es decir, sin una capa de óxido que los separe) y en la que los electrones puedan, por tanto, transmitirse con facilidad de un electrodo al otro. Tampoco podríamos analizar utilizando BCS una situación en la que el parámetro superconductor varía espacialmente debido, por ejemplo, a la presencia de un gradiente de campo magnético. Esta última situación puede darse tanto en la superficie de un superconductor como en el volumen en torno a un vórtice en superconductores de tipo II.

En este último capítulo estudiaremos las ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes (BdG) que describen el espectro de excitaciones de un superconductor espacialmente inhomogéneo. Estas ecuaciones se basan en la idea, inicialmente señalada por Anderson, de que, aún cuando k no es un buen número cuántico, cada estado electrónico con función de onda $\phi_n(\vec{r})$ y espín σ puede acoplarse para formar un par con el estado inverso temporal, es decir con el estado con función de onda $\phi_n^*(\vec{r})$ y espín $-\sigma$. Nuestro primer objetivo será derivar las ecuaciones de BdG a partir de un modelo microscópico general para luego estudiar

las soluciones de estas ecuaciones para sistemas unidimensionales sencillos que son, sin embargo, de gran importancia práctica.

Cabe destacar que existe otra aproximación a problemas en los que el parámetro de orden varía espacialmente, basada en la teoría fenomenológica de Ginzburg-Landau, que no veremos en este curso.

7.0.5. Derivación microscópica

Vamos a suponer que los electrones en el superconductor experimentan un potencial externo $U_0(r)$ (este potencial puede describir tanto el efecto de campos externos como el efecto de impurezas o la presencia de una superficie o intercaras en el sistema). A primera vista, la manera natural de tratar este término adicional en el Hamiltoniano es construyendo una función de onda tipo BCS a partir de estados de un electrón cuya función de onda $w_n(r)$ es solución de la ecuación de Schrödinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_0(r) - \mu\right)w_n(r) = \zeta_n w_n(r)$$

Como decíamos antes, hay dos estados degenerados por cada nivel de energía ζ_n :

$$w_n = w_n(r)|\uparrow\rangle \quad \text{y} \quad w_{\bar{n}} = w_n^*(r)|\downarrow\rangle$$

Luego, si designamos por c_n^\dagger al operador que crea un electrón en el estado w_n , una generalización posible de la función de prueba de la teoría BCS para este caso es:

$$|\tilde{\Phi}\rangle = \prod_n \left(u_n + v_n c_n^\dagger c_{\bar{n}}^\dagger\right) |0\rangle$$

El problema con esta función de prueba es que, siendo los u_n y v_n coeficientes constantes no nos proporciona suficiente flexibilidad como para tratar situaciones generales de inhomogeneidad espacial. De hecho, se puede demostrar que en muchos casos la energía puede reducirse apareando los electrones en estados distintos de los w_n .

Las ecuaciones de BdG constituyen un método más potente de resolver el problema. Para su derivación microscópica comenzaremos por escribir el Hamiltoniano (4.1) de la teoría BCS en términos de operadores campo $\psi_\sigma(r)$ y $\psi_\sigma^\dagger(r)$ que destruyen y crean electrones localizados en un punto r del espacio. Estos operadores se relacionan con los $c_{k\sigma}$, $c_{k\sigma}^\dagger$ a través de:

$$\psi_\sigma(r) = \sum_k e^{ikr} c_{k\sigma} \quad \text{y} \quad \psi_\sigma^\dagger(r) = \sum_k e^{-ikr} c_{k\sigma}^\dagger$$

Estos operadores satisfacen las reglas de anticonmutación:

$$[\psi_\sigma(r), \psi_{\sigma'}(r')]_+ = 0 \quad [\psi_\sigma^\dagger(r), \psi_{\sigma'}^\dagger(r')]_+ = 0 \quad [\psi_\sigma(r), \psi_{\sigma'}^\dagger(r')]_+ = \delta_{\sigma,\sigma'}\delta(r-r')$$

La expresión del Hamiltoniano BCS (más el término asociado al potencial $U_0(r)$) que resulta es:

$$H = \int d^3r \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \left[\frac{p^2}{2m} + U_0(r) \right] \psi_{\sigma}(r) + \\ -V_0 \int d^3r \psi_{\uparrow}^{\dagger}(r) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(r) \psi_{\downarrow}(r) \psi_{\uparrow}(r)$$

El segundo término en H es el que toma en cuenta la interacción efectiva entre electrones. Notemos que esta interacción ocurre sólo cuando los dos electrones se encuentran en un mismo punto, lo cual es consistente con que la interacción en H^{BCS} se considera independiente de k . También como en BCS esta interacción depende de un único parámetro V_0 .

Como en la teoría BCS no se trata de resolver este modelo exactamente (lo cual resulta en general imposible) sino de buscar una buena aproximación a su estado fundamental y sus excitaciones. La aproximación que lleva a las ecuaciones de BdG consiste en reemplazar este Hamiltoniano de muchos cuerpos por un Hamiltoniano efectivo de un cuerpo, es decir, de la forma:

$$H_{efectivo} = \int d^3r \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \left[\frac{p^2}{2m} + U(r) - E_F \right] \psi_{\sigma}(r) + \\ + \Delta(r) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(r) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(r) + \Delta(r)^* \psi_{\downarrow}(r) \psi_{\uparrow}(r)$$

y determinar los potenciales efectivos $U(r)$ y $\Delta(r)$ de manera que cumplan ciertas condiciones de autoconsistencia. Esta filosofía es similar a la de la propia teoría BCS en la que Δ debe satisfacer una ecuación de autoconsistencia que se deriva de minimizar la energía.

Antes de determinar estas condiciones de consistencia vamos a analizar los autoestados de $H_{efectivo}$ suponiendo que U y Δ son conocidos. Como $H_{efectivo}$ es una forma cuadrática en los operadores campo se puede diagonalizar mediante una transformación unitaria, cuya forma es la misma que la de la transformación de Bogoliubov (Ec. (4.5)):

$$\psi_{\uparrow}(r) = \sum_m \gamma_{m\uparrow} u_m(r) - \gamma_{m\downarrow}^{\dagger} v_m(r) \\ \psi_{\downarrow}(r) = \sum_n \gamma_{n\downarrow} u_n(r) + \gamma_{n\uparrow}^{\dagger} v_n^*(r) \quad (7.1)$$

Por ser esta una transformación unitaria los nuevos operadores γ_n deben satisfacer también reglas de conmutación fermiónicas. Además esta transformación debe diagonalizar $H_{efectivo}$, con lo cual la expresión de $H_{efectivo}$ en términos de los γ_n será:

$$H_{efectivo} = E_0 + \sum_{n\sigma} \epsilon_n \gamma_{n\sigma}^{\dagger} \gamma_{n\sigma}$$

donde E_0 es la energía del estado fundamental. Esta condición también puede escribirse en la siguiente forma:

$$\begin{aligned} [H_{efectivo}, \gamma_{n\sigma}] &= -\epsilon_n \gamma_{n\sigma} \\ [H_{efectivo}, \gamma_{n\sigma}^\dagger] &= \epsilon_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \end{aligned}$$

Por otra parte, los conmutadores de ψ_\uparrow y ψ_\downarrow con $H_{efectivo}$ dan (hacerlo como ejercicio):

$$\begin{aligned} [H_{efectivo}, \psi_\uparrow(r)] &= -\left(\frac{p^2}{2m} + U(r) - E_F\right)\psi_\uparrow(r) - \Delta(r)\psi_\downarrow^\dagger(r) \\ [H_{efectivo}, \psi_\downarrow(r)] &= -\left(\frac{p^2}{2m} + U(r) - E_F\right)\psi_\downarrow(r) + \Delta(r)\psi_\uparrow^\dagger(r) \end{aligned}$$

Si sustituimos en esta ecuación los operadores campo por su expresión en términos de los operadores γ_n dada por (7.1) e igualamos los coeficientes de γ_n y γ_n^\dagger a cada lado de la ecuación se obtiene (hacerlo como ejercicio):

$$\begin{aligned} \epsilon_n u_n(r) &= \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(r) - E_F \right] u_n(r) + \Delta(r) v_n(r) \\ \epsilon_n v_n(r) &= -\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(r) - E_F \right] v_n(r) + \Delta^*(r) u_n(r) \end{aligned} \quad (7.2)$$

Estas ecuaciones acopladas en $u_n(r)$ y $v_n(r)$ se conocen como ecuaciones de Bogolibov de Gennes.

Determinación de los potenciales efectivos $U(r)$ y $\Delta(r)$

Para la determinación de los potenciales efectivos en las ecuaciones de BdG utilizaremos un procedimiento similar al que utilizamos para derivar la teoría BCS a temperatura finita. Es decir, para determinar Δ y U minimizaremos la energía libre

$$F = \langle H \rangle - TS$$

considerando ahora que el promedio $\langle H \rangle$ se efectúa sobre la base de autoestados de $H_{efectivo}$.

La manera de obtener $\langle H \rangle$ es expresar el Hamiltoniano H en términos de los operadores γ_n y luego tomar el valor medio sabiendo que

$$\langle \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{m\sigma'} \rangle = \delta_{nm} \delta_{\sigma\sigma'} f(\epsilon_n)$$

donde $f(\omega)$ es la función de distribución de Fermi. En lugar de hacer toda esta cuenta podemos calcular la variación de primer orden en F , δF a temperatura fija, sabiendo que, debido al teorema de Wick, tenemos

$$\begin{aligned} \langle \psi_\uparrow^\dagger \psi_\downarrow^\dagger \psi_\downarrow \psi_\uparrow \rangle &= \langle \psi_\uparrow^\dagger \psi_\uparrow \rangle \langle \psi_\downarrow^\dagger \psi_\downarrow \rangle - \langle \psi_\uparrow^\dagger \psi_\downarrow \rangle \langle \psi_\downarrow^\dagger \psi_\uparrow \rangle \\ &\quad + \langle \psi_\uparrow^\dagger \psi_\downarrow^\dagger \rangle \langle \psi_\downarrow \psi_\uparrow \rangle \end{aligned}$$

En esta expresión el segundo término contiene correlaciones entre espines opuestos, de la forma $\langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow} \rangle$ que podemos considerar nulas ya que estamos en una situación *no magnética*. De esta manera obtenemos

$$\begin{aligned} \delta F &= \int d^3r \sum_{\sigma} \delta \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \left[\frac{p^2}{2m} + U_0(r) \right] \psi_{\sigma}(r) \rangle + \\ &\quad - V_0 \sum_{\sigma} \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \psi_{\sigma}(r) \rangle \delta \langle \psi_{-\sigma}^{\dagger}(r) \psi_{-\sigma}(r) \rangle + \\ &\quad - V_0 \delta \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(r) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(r) \rangle \langle \psi_{\downarrow}(r) \psi_{\uparrow}(r) \rangle + c.c. - T \delta S \end{aligned} \quad (7.3)$$

Por otra parte, sabemos que la cantidad

$$F_1 = \langle H_{efectivo} \rangle - TS$$

debe ser estacionaria con respecto a variaciones en las funciones $u_n(r)$, $v_n(r)$ y $f(\omega)$, ya que estamos haciendo el promedio sobre una base de autoestados del propio $H_{efectivo}$. De esta manera obtenemos

$$\begin{aligned} \delta F_1 &= \int d^3r \sum_{\sigma} \delta \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(r) \left[\frac{p^2}{2m} + U(r) \right] \psi_{\sigma}(r) \rangle + \\ &\quad + \Delta(r) \delta \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(r) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(r) \rangle + c.c. - T \delta S = 0 \end{aligned} \quad (7.4)$$

Así, los potenciales efectivos $U(r)$ y $\Delta(r)$ se determinan estableciendo una correspondencia entre los términos en $\delta \langle \psi_{\sigma}^{\dagger} \psi_{\sigma} \rangle$ y en $\delta \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger} \psi_{\downarrow}^{\dagger} \rangle$ en las ecuaciones (7.3) y (7.4), de donde resulta:

$$\begin{aligned} U(r) - U_0(r) &= -V_0 \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(r) \psi_{\uparrow}(r) \rangle = -V_0 \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(r) \psi_{\downarrow}(r) \rangle \\ \Delta(r) &= -V_0 \langle \psi_{\uparrow}(r) \psi_{\uparrow}(r) \rangle \end{aligned} \quad (7.5)$$

La expresión final para estos potenciales se determina sustituyendo los operadores campo en términos de los operadores γ de acuerdo a la transformación (7.1). El resultado que se obtiene (hacerlo como ejercicio) es:

$$\begin{aligned} U(r) - U_0(r) &= -V_0 \sum_n [u_n(r)^2 f(\epsilon_n) + v_n(r)^2 (1 - f(\epsilon_n))] \\ \Delta(r) &= V_0 \sum_n v_n(r) u_n(r) (1 - 2f(\epsilon_n)) \end{aligned} \quad (7.6)$$

Estas condiciones aseguran que los potenciales $U(r)$ y $\Delta(r)$ en $H_{efectivo}$ son autoconsistentes. El potencial $U(r) - U_0(r)$ es llamado *potencial Hartree*, mientras que $\Delta(r)$ tiene que ver con el gap en el espectro de excitaciones y se llama *potencial de apareamiento*. Hay una diferencia importante entre estos dos potenciales: mientras que el potencial de apareamiento se anula en el estado normal, el potencial Hartree permanece prácticamente invariante al pasar del estado normal al superconductor ya que depende muy débilmente con la temperatura. Por tanto, cuando nos interese analizar la diferencia entre las propiedades del estado normal y el superconductor, podemos despreñar el potencial Hartree.

7.0.6. Aplicación a problemas unidimensionales

A fin de familiarizarnos con las propiedades de las soluciones de las ecuaciones de BdeG es instructivo comenzar por analizar problemas unidimensionales. Vamos a ver que, a pesar de esta simplificación, muchos de estos resultados pueden aplicarse a situaciones realistas y de interés práctico.

Vamos a comenzar por el caso más simple posible de un superconductor homogéneo. Llamemos x a la coordenada espacial del problema. En este caso tenemos $\Delta(x) = \Delta_0$ y podemos suponer $U(x) = 0$ en las ecuaciones (7.2). Por otra parte, la dependencia de los u_n y los v_n con x no puede ser otra que la de una onda plana, es decir:

$$u_n(x) = u_n e^{\pm ikx} \quad , \quad v_n(x) = v_n e^{\pm ikx}$$

Resulta sencillo comprobar que lo que se obtiene al resolver la ecuación de autovalores que resulta al introducir estas expresiones en (7.2) es:

$$\epsilon_n = \sqrt{(\epsilon(k) - E_F)^2 + \Delta_0^2}$$

Estos autovalores son equivalentes a las energías de excitación de cuasi-partículas en la teoría BCS.

A fin de analizar problemas unidimensionales en forma similar a como lo hacemos con la ecuación de Schrödinger, es decir empalmado soluciones correspondientes a regiones homogéneas con las condiciones de borde apropiadas, es conveniente reescribir las soluciones tomando a las autoenergías ϵ_n como un parámetro libre E . Uno debe luego obtener $k(E)$ a partir de la ecuación $E = \sqrt{(\epsilon(k) - E_F)^2 + \Delta_0^2}$, de donde se obtienen dos posibles valores de k para cada E :

$$\hbar k^\pm = \sqrt{2m \left[E_F \pm \sqrt{E^2 - \Delta_0^2} \right]}$$

Estos dos valores se encuentran levemente por encima y por debajo de $\hbar k_F = \sqrt{2mE_F}$ respectivamente. En consecuencia, las cuasi-partículas que corresponden a k^+ y k^- tienen un carácter predominantemente de *electrón* y de *hueco* respectivamente. La figura 7.1 muestra en forma esquemática la relación entre energía y k en las soluciones de la ecuación de BdeG.

Por otra parte, los autoestados de las ecuaciones de BdeG pueden escribirse en la forma:

$$\Phi_n(x) = \begin{pmatrix} u_n(x) \\ v_n(x) \end{pmatrix}$$

Así, las funciones de onda correspondientes a un dado valor de la energía E resultan:

$$\Psi_e(x, E) = \begin{pmatrix} u_0(E) \\ v_0(E) \end{pmatrix} e^{\pm ik^+ x} \quad \Psi_h(x, E) = \begin{pmatrix} v_0(E) \\ u_0(E) \end{pmatrix} e^{\pm ik^- x}$$

donde

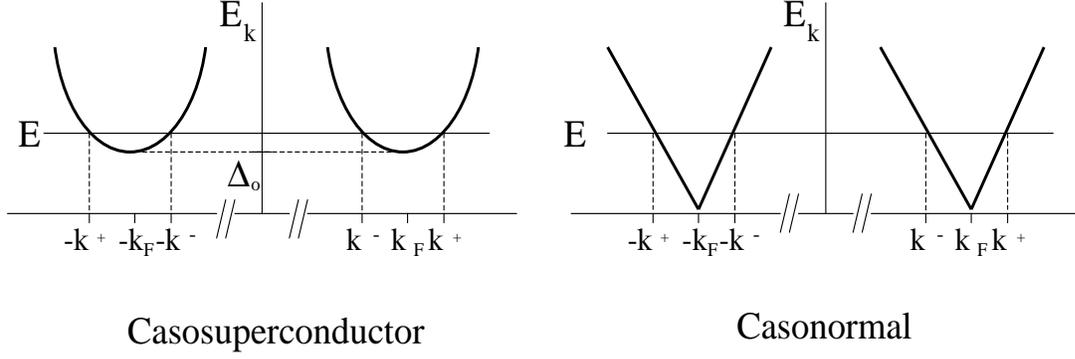


Figura 7.1: Relación de dispersión para las soluciones de la ecuación de Bogoliubov-de Gennes en una dimensión

$$1 - v_0^2 = u_0^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\sqrt{E^2 - \Delta_0^2}}{E} \right] \quad (7.7)$$

Los subíndices e y h indican el carácter predominante de “electrón” “hueco.” en las autofunciones correspondientes a k^+ y k^- respectivamente. De hecho, como puede verse, cuando $\Delta_0 \rightarrow 0$ tenemos:

$$\Psi_e(x, E) \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\pm iq^+ x} \quad \Psi_h(x, E) \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{\pm iq^- x}$$

donde $\hbar q^\pm = \sqrt{2m(E_F \pm E)}$. Puede verse claramente que Ψ_e y Ψ_h corresponden a excitaciones tipo electrón y hueco respectivamente para el caso normal.

Es importante señalar que en el caso normal (es decir cuando $\Delta_0 = 0$) puede suponerse una relación de dispersión prácticamente lineal para las bandas alrededor del nivel de Fermi. La figura 7.1 muestra también la relación entre la energía y k para un conductor normal unidimensional que se obtiene como el límite para $\Delta_0 \rightarrow 0$ del caso superconductor.

Para analizar problemas de transporte es útil, como vimos en la sección dedicada a uniones túnel, utilizar un esquema tipo semiconductor en el que se toman en cuenta tanto energías positivas como negativas para las cuasi-partículas. De hecho, las ecuaciones de BdeG admiten soluciones tanto con energías positivas como con negativas. Es fácil comprobar que $u_0^2(-E) = v_0^2(E)$, lo cual demuestra que al cambiar E por $-E$ las excitaciones con carácter de electrón pasan a tener carácter de hueco y viceversa. En un conductor normal este esquema se obtiene asociando los estados con $k < k_F$ a energías negativas (que corresponden a excitaciones tipo hueco) y los estados con $k > k_F$ a energías positivas (que corresponden a excitaciones tipo electrón).

7.0.7. La intercara N-S y la reflexión de Andreev

Vamos a considerar ahora el empalme entre las soluciones de las ecuaciones de BdeG correspondientes a una región normal semi-infinita seguida de otra región semi-infinita superconductora. Es decir, buscamos las soluciones de la ecuación de BdeG para un potencial de apareamiento que depende de la posición en la forma:

$$\Delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ \Delta_0 & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

Como ocurre normalmente en una intercara sobre la que incide un electrón tendremos una parte de la onda incidente que es transmitida y una parte de la onda que se refleja. En el caso de la intercara N-S existen más posibilidades que en una intercara normal porque un electrón incidente desde la región normal puede reflejarse como un electrón (reflexión normal) pero también, como veremos, puede reflejarse como un hueco. A este tipo de mecanismo se lo denomina *reflexión de Andreev*, en honor al físico ruso que propuso por primera vez el mecanismo hacia el año 1964.

A fin de determinar las amplitudes reflejadas y transmitidas supondremos que tenemos un electrón incidente desde la región normal con energía E . Para simplificar, vamos a considerar primero el caso en que no hay ninguna barrera de potencial entre el normal y el superconductor. Supondremos también que la variación en el vector de onda al pasar a la región superconductora es despreciable. Esto está justificado ya que si estamos interesados en energías del orden del gap ($E \sim \Delta_0$), tenemos $E \ll E_F$ y por tanto $k^\pm \simeq q^\pm$. En estas condiciones no se produce reflexión normal y todo lo que podríamos tener es un hueco reflejado con impulso $\hbar q^-$ en la región normal. Por otra parte, en la región superconductora tendremos una excitación tipo electrón transmitida con impulso $\hbar k^+$. El proceso se representa esquemáticamente en la figura 7.2. Nótese que un hueco reflejado corresponde a impulso $+\hbar q^-$ (y no $-\hbar q^-$), ya que un electrón moviéndose hacia la derecha corresponde a un hueco moviéndose hacia la izquierda.

Las funciones de onda a cada lado de la intercara serán de la forma:

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{iq^+x} + r_A \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{iq^-x} \quad \text{si } x < 0 \\ & t \begin{pmatrix} u_0(E) \\ v_0(E) \end{pmatrix} e^{ik^+x} \quad \text{si } x > 0 \end{aligned}$$

donde $\hbar q^\pm = \sqrt{2m(E_F \pm E)}$ indica el impulso del electrón incidente y del hueco reflejado en la región normal.

Para determinar las amplitudes r_A y t es necesario imponer las condiciones de continuidad en la función y su derivada en el punto $x = 0$. Si suponemos, como dijimos, que no se produce una discontinuidad apreciable en el vector de onda, es decir, que podemos considerar $q^+ \simeq q^- \simeq k^+$, entonces basta con imponer sólo la primera condición. Esta última aproximación se conoce como aproximación de Andreev. En este caso se obtiene un resultado muy sencillo para la amplitud de reflexión Andreev:

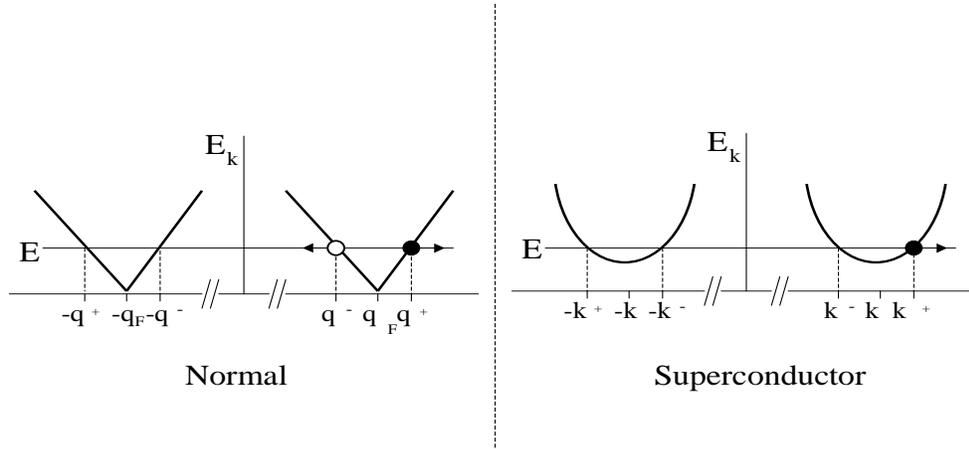


Figura 7.2: Esquema de la reflexión de Andreev en una intercara N-S

$$r_A(E) = v_0(E)/u_0(E)$$

Vamos a analizar primero este resultado para $E < \Delta_0$. De la expresión (7.7) vemos que u_0 y v_0 toman valores complejos cuando $E < \Delta_0$. De hecho, también k^+ adquiere en este caso una pequeña parte imaginaria, lo cual indica que para estas energías la función de onda decae exponencialmente hacia el interior del superconductor. Volviendo a r_A vemos que para $E < \Delta_0$ esta amplitud se puede escribir en la forma (demostrarlo como ejercicio):

$$r_A(E) = \exp[-i \arccos(E/\Delta_0)] \quad (7.8)$$

lo cual indica que la probabilidad de reflexión Andreev $|r_A|^2$ vale 1 en el interior del gap.

Por otra parte, cuando $E > \Delta_0$ vemos que los coeficientes u_0 y v_0 son reales y r_A se puede expresar como (hacerlo para completar el ejercicio):

$$r_A(E) = \exp[-\operatorname{arccosh}(E/\Delta_0)] \quad (7.9)$$

lo cual demuestra que la probabilidad de reflexión Andreev decae rápidamente cuando $E > \Delta$.

Analicemos por último el proceso de reflexión Andreev desde el punto de vista de la carga transmitida. En un sistema normal, el tener reflexión perfecta ($|r|^2 = 1$) implica que la carga transmitida es nula. En cambio, en el caso de la reflexión de Andreev tenemos un electrón incidente (es decir una carga negativa $-e$ que se desplaza en el sentido positivo) y un hueco reflejado (es decir una carga positiva $+e$ desplazándose en el sentido negativo). El efecto neto es equivalente al de *dos* cargas $-e$ desplazándose en el sentido positivo de x . Como la carga no puede acumularse en la intercara es evidente que la carga transmitida hacia el

superconductor por cada proceso individual debe ser $-2e$. En consecuencia el proceso lleva asociada una corriente de electrones neta hacia el superconductor.

¿Cómo compatibilizar ahora esta corriente neta con el hecho de tener una función de onda que decae exponencialmente a medida que nos introducimos en el superconductor?

La explicación es que dentro del superconductor no son realmente estas excitaciones las que llevan la corriente sino los pares de Cooper que forman el condensado. Por cada electrón incidente en la intercara desde el lado normal con energía $E < \Delta$ debe haber un par de Cooper que se lleva la carga dentro del superconductor. Este esquema de la reflexión de Andreev se muestra en la figura 7.3.

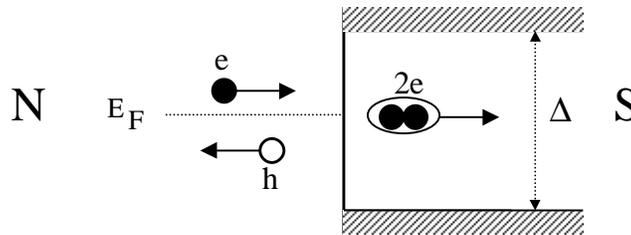


Figura 7.3: Esquema de una reflexión de Andreev: el electrón incidente se refleja como hueco y se emite un par de Cooper dentro del superconductor

Es interesante comparar el caso de una intercara N-S *perfecta* como la que hemos analizado, en la que no se produce reflexión normal, con el caso de una unión túnel entre un electrodo normal y uno superconductor. En ese caso la probabilidad de transmisión a través de la capa de óxido es muy pequeña y, como vimos, la corriente a través de la unión se puede obtener utilizando teoría de perturbaciones al orden más bajo en el acoplamiento entre los electrodos. Como vimos en el capítulo anterior, en una unión túnel de este tipo a temperatura cero no hay corriente hasta que el voltaje aplicado supera el valor del gap, es decir hasta que la energía de los electrones que se inyectan desde el lado normal supera a Δ_0 . En cambio en una intercara N-S perfecta podemos tener una corriente aún cuando $V < \Delta_0$ debido a los procesos de reflexión de Andreev. La pregunta que surge entonces es qué ocurre con las reflexiones de Andreev a medida que la barrera entre la región normal y la superconductora se va haciendo más fuerte. Para analizar esta situación les propongo el siguiente problema:

Problema nro. 12: Analizar la amplitud de reflexión Andreev para una intercara que incluye una barrera de potencial tipo δ de Dirac, es decir tomando

$U_0(x) = H\delta(x)$. Ayuda: deben tener en cuenta que ahora podemos tener también una excitación tipo electrón reflejada y también excitaciones tipo hueco transmitidas, es decir que la función de onda adopta la forma más general:

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{iq^+x} + r_A \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{iq^-x} + r \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-iq^+x} \quad \text{si } x < 0 \\ & t \begin{pmatrix} u_0(E) \\ v_0(E) \end{pmatrix} e^{ik^+x} + t_A \begin{pmatrix} v_0(E) \\ u_0(E) \end{pmatrix} e^{-ik^-x} \quad \text{si } x > 0 \end{aligned}$$

Por otra parte, debido a la presencia de la delta, la condición de continuidad en la derivada en el punto $x = 0$ se reemplaza ahora por:

$$\frac{\hbar}{2m} (\Psi'(x=0^+) - \Psi'(x=0^-)) = H\Psi(0)$$

Utilizando la aproximación de Andreev (es decir, tomando $q^+ \simeq q^- \simeq k^+ \simeq k^-$), deben demostrar que, en este caso, para $E < \Delta_0$ se obtiene:

$$|r_A(E)|^2 = \frac{\Delta_0^2}{E^2 + (\Delta_0^2 - E^2)(1 + 2Z)^2}$$

donde $Z = k_F H / 2E_F$.

Esta expresión describe la transición entre el límite de reflexión de Andreev perfecta (que ocurre cuando $Z \rightarrow 0$) y el límite en que $r_A \rightarrow 0$ (que ocurre cuando la barrera es infinitamente alta, es decir cuando $Z \rightarrow \infty$).

7.0.8. La intercara S-N-S: reflexiones de Andreev múltiples

Vamos a analizar ahora el espectro de excitaciones en una intercara S-N-S. Una vez que hemos comprendido como hacerlo para una intercara N-S la generalización al caso S-N-S es relativamente simple. Veremos, además, que el comprender este caso nos dará una visión distinta y muy instructiva acerca del efecto Josephson.

Consideremos que tenemos una región normal de longitud L entre dos superconductores semi-infinitos. Para simplificar el análisis vamos a suponer en un principio que no existe una barrera de potencial que produzca reflexión normal en las intercara. Supondremos también que existe una diferencia de fase superconductor Φ entre los dos superconductores. Esta diferencia de fase se reparte entre los dos superconductores de manera que podemos considerar que la fase vale $\Phi/2$ en el superconductor de la izquierda y $-\Phi/2$ en el de la derecha. Esta situación se esquematiza en la figura 7.4.

Analícemos ahora que ocurre con los estados electrónicos de la región normal con energía $E < \Delta_0$. Un electrón que se propaga en el sentido positivo sufrirá una reflexión de Andreev completa al llegar a la intercara con el superconductor de la derecha. A partir de entonces se convertirá en un hueco que se propaga en sentido negativo, el cual a su vez sufrirá una reflexión de Andreev completa al llegar a la intercara de la izquierda. Así, este proceso se podría repetir ad infinitum, formando una onda estacionaria en la región central, de forma similar

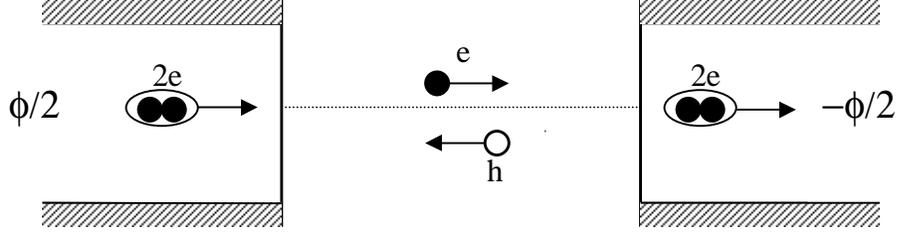


Figura 7.4: Interfase SNS

a lo que ocurre en un interferómetro de Fabry-Perot. Al igual que en el caso del interferómetro la energía E debe tener unos valores determinados para que se den las condiciones de resonancia.

Para determinar estos valores vamos a sumar las amplitudes de los procesos sucesivos a fin de determinar la condición de resonancia. El estado inicial es el de un electrón que se propaga en sentido positivo cuya función de onda es:

$$\Psi_e^{(0)}(x, E) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{iq^+x}$$

Luego de la primera reflexión lo que tenemos es un hueco que se propaga en sentido negativo:

$$\Psi_h^{(1)}(x, E) = r_A^D(E) e^{iq^+L} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{iq^-x}$$

Notar que, como hemos supuesto que $E < \Delta_0$, la amplitud $r_A^D(E)$ está dada por la ecuación (7.8). Tenemos que tener en cuenta, además, que el superconductor de la derecha tiene una fase $-\Phi/2$, con lo cual resulta

$$r_A^D(E) = e^{-i\Phi/2} r_A(E)$$

Siguiendo el proceso, este hueco se reflejará Andreev en la intercara de la izquierda, produciendo una amplitud adicional tipo electrón dada por

$$\Psi_e^{(2)}(x, E) = r_A^I(E) r_A^D(E) e^{i(q^+ - q^-)L} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{iq^+x}$$

donde la amplitud $r_A^I(E)$ es la amplitud para la reflexión de Andreev del hueco incidente en el superconductor de la izquierda. Para obtener esta amplitud debemos repetir lo que hicimos en la clase anterior considerando un hueco incidente en lugar de un electrón. Les dejo como ejercicio probar que resulta la misma

amplitud que para un electrón incidente en la intercara de la derecha, es decir que $r_A^I(E) = r_A^D(E)$.

De esta manera, si sumamos las amplitudes para el “canal” de electrón debidas a procesos sucesivos lo que obtenemos es:

$$\frac{1}{1 - e^{-i\Phi} r_A^2(E) e^{i(q^+ - q^-)L}}$$

con lo cual, la condición de resonancia es:

$$e^{-i\Phi} r_A(E) e^{i(q^+ - q^-)L} = 1 \implies -\Phi - 2 \arccos E/\Delta_0 + (q^+ - q^-)L = 2n\pi$$

Podemos reescribir esta condición tomando en cuenta que para $E \sim \Delta_0$, $q^\pm \simeq k_F(1 \pm E/2E_F)$, con lo cual resulta:

$$E = \Delta_0 \cos \left\{ \frac{\Phi}{2} - \frac{k_F L}{2} (E/E_F) - n\pi \right\} \quad (7.10)$$

Esta ecuación da, aparentemente infinitos valores posibles para la energía de nuestro estado resonante. Sin embargo, cuando L es muy pequeña el término en k_F en el argumento del coseno no cuenta y sólo tenemos dos valores posibles para E :

$$E = \pm \Delta_0 \cos \left(\frac{\Phi}{2} \right) \quad (7.11)$$

Mas concretamente, la condición para que el término en k_F no cuente es que $L \ll 2E_F/(Ek_F) \simeq \hbar v_F/\Delta_0 = \xi_0$, es decir, L debe ser muy pequeña en comparación a la longitud de coherencia ξ_0 . Podemos ver de la ecuación (7.10) que el número de soluciones aumenta a medida que aumenta L (de hecho, uno debería recuperar un continuo de soluciones cuando $L \rightarrow \infty$).

Vamos a concentrarnos en el caso $L \rightarrow 0$, que podría describir un contacto puntual entre dos superconductores. ¿Qué diferencia física existe entre los dos estados ligados que acabamos de encontrar?. Es fácil intuir que cada estado corresponderá a recorrer el ciclo de múltiples reflexiones Andreev en sentido inverso, es decir en sentido positivo como electrón y en sentido negativo como hueco o al contrario. Notar que, como vimos en la clase anterior, cada electrón que incide sobre un superconductor y se refleja Andreev produce un flujo de carga $-2e$ hacia el superconductor. Por el contrario, el hueco que incide sobre el superconductor y se refleja Andreev produce un flujo de carga $+2e$ hacia el superconductor. Este razonamiento nos lleva a concluir que cada estado ligado lleva una corriente igual pero de sentido opuesto.

La pregunta que nos hacemos ahora es “¿Cómo determinar esta corriente? En principio deberíamos evaluar el valor medio del operador corriente en nuestro estado. Esto es, si conocemos la función de onda del estado:

$$\Psi(x, E) = \begin{pmatrix} u(x, E) \\ v(x, E) \end{pmatrix}$$

La corriente estará dada por:

$$i(E) = \frac{e\hbar}{m} \text{Im} \left[u^*(x, E) \frac{\partial u(x, E)}{\partial x} + v^*(x, E) \frac{\partial v(x, E)}{\partial x} \right]$$

Pero esto es complicado ya que nos obliga a determinar la función de onda que no tenemos. Una forma mucho más sencilla es utilizar la relación termodinámica:

$$I = \frac{2e}{\hbar} \frac{\partial F}{\partial \Phi}$$

que nos dice que la corriente debida a cada estado debe ser:

$$i^{\pm} = \pm \frac{2e}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \phi} = \pm \frac{2e\Delta_0}{\hbar} \text{sen}\left(\frac{\Phi}{2}\right)$$

Lo más interesante que cabe señalar en esta expresión es la dependencia de la corriente con la fase como $\text{sen}(\Phi/2)$, a diferencia de lo que vimos en una unión túnel en donde la corriente Josephson dependía de la diferencia de fase como $\text{sen}(\Phi)$. Cabe destacar que en aquel caso la corriente Josephson se puede calcular utilizando teoría de perturbaciones al orden más bajo en el acoplamiento entre los electrodos, mientras que en el caso de un contacto perfecto hay que tener en cuenta las múltiples reflexiones de Andreev. Como en la clase anterior nos gustaría poder analizar qué ocurre a medida que la barrera entre los dos electrodos superconductores se va haciendo más fuerte hasta llegar al caso extremo de la unión túnel. Para esto les propongo el siguiente problema:

Problema nro. 13: A fin de estudiar una intercara S-S con una barrera de potencial arbitrario, considerar un sistema S-N-S en el cual se introduce una barrera de potencial en el medio de la región normal, como muestra esquemáticamente la figura 7.5. Llamaremos I y II a las dos regiones en que queda dividida la región normal.

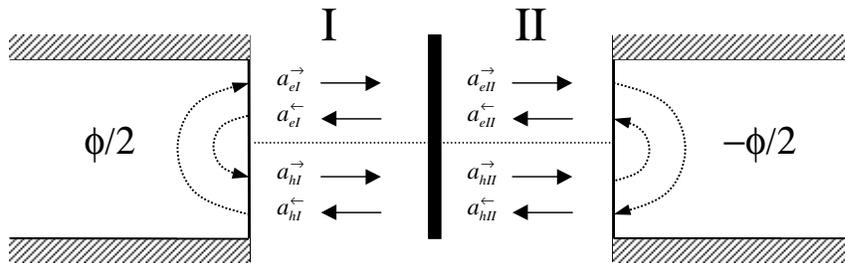


Figura 7.5: Geometría propuesta en el problema nro. 13

Asimismo, llamaremos a_{eI}^{\rightarrow} , a_{eI}^{\leftarrow} , a_{eII}^{\rightarrow} , a_{eII}^{\leftarrow} , a_{hI}^{\rightarrow} , a_{hI}^{\leftarrow} , a_{hII}^{\rightarrow} , y a_{hII}^{\leftarrow} a las amplitudes tipo electrón y hueco en cada una de las dos regiones. Para simplificar el problema vamos a suponer que $L \ll \xi_0$ con lo cual podemos despreciar los

factores de fase debidos a la propagación libre. Para vincular las amplitudes a uno y otro lado de la barrera tenemos las siguientes relaciones

$$\begin{pmatrix} a_{eI}^{\leftarrow} \\ a_{eII}^{\rightarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ir & t \\ t & ir \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{eI}^{\rightarrow} \\ a_{eII}^{\leftarrow} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{hI}^{\leftarrow} \\ a_{hII}^{\rightarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ir & t \\ t & ir \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{hI}^{\rightarrow} \\ a_{hII}^{\leftarrow} \end{pmatrix}$$

donde r y t son las amplitudes de reflexión y transmisión normal a través de la barrera central que vamos a suponer reales. Notar también que se cumple $r^2 + t^2 = 1$.

Por otra parte las amplitudes de hueco y electrón están relacionadas por medio de los factores de fase que introducen las reflexiones de Andreev en las intercaras con los superconductores a izquierda y a derecha:

$$a_{hII}^{\leftarrow} = e^{-i\Phi/2} r_A a_{eII}^{\rightarrow} \quad a_{eI}^{\rightarrow} = e^{-i\Phi/2} r_A a_{hI}^{\leftarrow}$$

$$a_{hI}^{\rightarrow} = e^{i\Phi/2} r_A^* a_{eI}^{\leftarrow} \quad a_{eII}^{\leftarrow} = e^{i\Phi/2} r_A^* a_{hII}^{\rightarrow}$$

Estas relaciones determinan un sistema homogéneo de 8 ecuaciones con 8 incógnitas. A partir de la condición para que el sistema tenga solución no-trivial demostrar que las energías de los dos estados ligados están dadas por:

$$E = \pm \Delta_0 \sqrt{1 - t^2 \text{sen}^2(\Phi/2)}$$

Como podemos ver, esta expresión se reduce la expresión (7.11) en ausencia de barrera, es decir cuando $t \rightarrow 1$. Asimismo, esta expresión nos permite obtener la corriente que lleva cada estado para el caso de transmisión arbitraria, que resulta:

$$i^{\pm} = \pm \frac{e\Delta_0 t^2}{2\hbar} \frac{\text{sen}(\Phi)}{\sqrt{1 - t^2 \text{sen}^2(\Phi/2)}} \quad (7.12)$$

La ecuación (7.12) interpola correctamente entre el comportamiento tipo $\text{sen}(\Phi)$ característico de una unión túnel ($t \rightarrow 0$) y el comportamiento tipo $\text{sen}(\Phi/2)$ que corresponde al caso de transmisión perfecta.

BIBLIOGRAFIA

- 1) A. Abrikosov *Fundamentals of the Theory of Metals* (North Holland, 1988).
- 2) N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics* (Holt, Rinehart and Winston, 1976).
- 3) P.G. de Gennes *Superconductivity of Metals and Alloys*, (Benjamin, 1966).
- 4) C. Kittel *Introduction to Solid State Physics*, 5ta edición (J.Wiley, 1976).
La versión española de la cuarta edición ha sido editada por Reverté (1979).
- 5) G. Rickayzen *Theory of Superconductivity* (J. Wiley & Sons, 1965).
- 6) J.R. Schrieffer *Theory of Superconductivity*, 2da. edición (Benjamin, 1986).
- 7) M. Tinkham *Introduction to Superconductivity*, 2da. edición (McGraw-Hill, 1996).