



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

ESPECTRO DE ENERGÍA DE SUPERCONDUCTORES PERIÓDICOS

Camilo Andrés Martínez Montero

Universidad Nacional de Colombia

Ciencias, Física

Bogotá D.C., Colombia

2014

ESPECTRO DE ENERGÍA DE SUPERCONDUCTORES PERIÓDICOS

CAMILO ÁNDRES MARTÍNEZ MONTERO

Tesis o trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Ciencias - Física

Director(a):
Doctor en Física WILLIAM JAVIER HERRERA

Línea de Investigación:
Superconductividad
Grupo de Investigación:
Superconductividad y nanoestructuras

Universidad Nacional de Colombia
Ciencias, Física
Bogotá D.C., Colombia
2014

Resumen

El presente trabajo abarca una aproximación al estudio de superconductividad en materiales, en los cuales el potencial de pares es periódico y no se desprecia el potencial de la red de iones. Para ello se realiza el estudio de las bandas de energía de los materiales, partiendo de los modelos de electrones cuasi-libres y “Tight Binding”. Se obtiene un análisis introductorio para diversos casos que se pueden presentar debido a las diferentes características de las superficies de Fermi de los materiales. En el modelo de electrones cuasi-libres se encuentran tres brechas las cuales aparecen sobre la superficie de Fermi, plano de Bragg y esfera de Andreev. Se realizan análisis para varios casos de solapamiento de estas brechas obteniendo en particular que en el plano de Bragg existe un cambio en el espectro debido a la esfera de Andreev. En el modelo “Tight Binding” se encuentra que el parámetro de acople determina la superficie de Fermi y la posibilidad de obtener reflexiones de Andreev. La anisotropía del potencial de pares está relacionada con los parámetros no locales y existe una condición que reproduce un espectro isotrópico.

Palabras clave: Superconductividad, Tight Binding, electrones cuasi-libres.

Abstract

The present work is an approximation to the study of superconductivity in materials that have a periodic pair potential and without a negligible potential of the ion lattice. For that we do the study of energy bands, based in models of nearly free electrons and Tight Binding. We obtain an analysis introductory for a lot of cases that we can have considering the different Fermi surfaces of materials. In the nearly free electrons model we get three gaps that appear over the Fermi surface, plane Braggs and Andreev sphere. In the Tight Binding model we get that hopping affect the Fermi surface and the possibility of have Andreev reflection. The anisotropy of pair potential is related with the non local pair potentials and exist a condition that let us have a isotropic spectrum.

Palabras clave: Superconductivity, Tight Binding, Nearly Free Electrons.

Índice

1. Introducción	1
2. Marco teórico	4
2.1. Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes en el espacio real	4
2.2. Teorema de Bloch y aproximación de electrones cuasi-libres	7
2.3. Modelo “Tight Binding”	13
2.4. Superconductividad en sistemas periódicos	15
2.5. Ecuaciones de Bogoliubov de-Gennes en el modelo “Tight Binding”	17
3. Superconductividad en la aproximación de electrones cuasi-libres	20
3.1. Ecuaciones de Bogoliubov de-Gennes en la aproximación de electrones cuasilibres.	20
3.2. Primer caso brecha sobre la superficie de Fermi lejos de planos de Bragg y esferas de Andreev	28
3.3. Brecha en el caso de sólo un plano de Bragg o esfera de Andreev	28
3.4. Cuando la esfera de Andreev corta un plano de Bragg	33
3.5. Dibujar un espectro de energía	36
4. Modelo “Tight Binding” para superconductores	40
4.1. Sistema unidimensional	41
4.2. Sistema bidimensional	51
5. Conclusiones	63
A. Relaciones de auto-consistencia	65
B. Brecha para superconductores homogéneos	70

C. Cuando el plano de Bragg afecta la superficie de Fermi	71
D. Forma de obtener las figuras para los espectros	73
E. Coeficientes de la ecuación para obtener el espectro de energía	75

1. Introducción

La superconductividad es un estado que se caracteriza por tener resistividad cero y presentar efecto Meissner. Su estudio desde el punto de vista teórico está basado principalmente en dos teorías, la teoría fenomenológica de Ginzburg–Landau en donde se introduce un parámetro de orden, dicho parámetro describe la transición de fase de metal en estado normal a superconductor y la norma es proporcional al número pares de electrones correlacionados entre si [1, 2]; y la teoría microscópica de Bardeen, Cooper, y Schrieffer (BCS) donde se introduce una potencial atractivo neto entre pares de electrones, estos reciben el nombre de pares de Cooper y la energía necesaria para destruir un par es de 2Δ [3, 4]. Uno de los elementos fundamentales de la teoría BCS es la aproximación de campo medio, donde se obtiene el potencial de pares (Δ) y el potencial de Hartree-Fock. Cuando se realiza la transformación de Bogoliubov se diagonaliza el Hamiltoniano obteniendo los estados base de energía que están formados por pares de electrones acoplados (pares de Cooper) y las excitaciones que corresponden a retirar uno de los electrones del par lo cual da lugar a un par electrón hueco. Gor'kov demuestra que el parámetro de orden de la teoría fenomenológica y el potencial Δ están relacionados cerca de la temperatura donde ocurre la transición de fase.

En la teoría BCS el módulo del potencial Δ es proporcional al número de electrones apareados y su fase está relacionada con la correlación de largo alcance entre los electrones del sistema. En los superconductores de baja temperatura crítica el potencial Δ suele modelarse como homogéneo e isotrópico, esto quiere decir, que el acople entre los electrones es independiente de la posición relativa de los mismos y además su magnitud es constante en cualquier dirección del vector de onda en el espacio recíproco, esta aproximación es coherente cuando se desprecian otros tipos de interacción, como para el caso de los metales la interacción de Coulomb entre electrones, o la de los electrones con los iones de la red [4].

Para la mayoría de superconductores de alta temperatura crítica (HTC) se proponen un potencial de pares anisotrópicos [5, 6, 7], donde los términos del potencial de pares pueden depender del vector de onda en el espacio recíproco y tener diferentes valores sobre la superficie de Fermi [8, 9]. Los estudios de la simetría del potencial de pares en HTC se han centrado en simetrías tipo p y tipo d [10], aunque hasta el momento no hay un consenso de cuál debería ser para la mayoría de los materiales HTC, se cree que la simetría mas posible es la tipo d para los cupratos. Para el caso de los sistemas inhomogéneos, el potencial Δ puede variar con la posición, tal como sucede en la interface entre un metal normal y un superconductor. En este caso tenemos un potencial de pares cero en el metal normal y máximo dentro del superconductor [11].

Cuando se hace incidir desde la región normal un electrón sobre la interface metal normal - supercon-

ductor, con energía tal que no le es suficiente para transmitirse como una excitación al superconductor, éste último toma otro electrón del metal normal transmitiéndose como un par de Cooper en el superconductor, mientras que en la región normal es reflejado como un hueco, este proceso es llamado reflexión de Andreev. Este tipo de reflexiones es fundamental para el estudio del transporte en interfaces con superconductores y es una de las consecuencias más importantes de la inhomogeneidad del potencial de pares.

Aunque las inhomogeneidades del potencial de pares se suelen estudiar en junturas de diversos tipos, se puede tener un potencial Δ inhomogéneo debido al potencial de la red cristalina. En los materiales en bloque “bulk” se suele modelar con un potencial homogéneo, sin embargo, hay algunos estudios [12, 13] que muestran que el potencial Δ puede tener la misma periodicidad que la red de Bravais, y por lo tanto es inhomogéneo.

En los metales donde los electrones no interactúan entre si, sí no con un potencial periódico producido por la red de iones, se encuentra que los estados satisfacen el teorema de Bloch. Con este teorema se puede realizar dos tipos de aproximación. La primera es llamada de electrones cuasi-libres [2, 3], en ésta aproximación el potencial de la red de iones se considera de orden perturbativo. Con el modelo se realiza una solución usando expansiones en series de Fourier y la teoría de perturbaciones; encontrando planos donde ocurre reflexiones electrónicas denominados planos de Bragg.

Un segundo modelo para el estudio de metales es “Tight Binding” (TB) [3, 14]. En este modelo se supone que los electrones están ligados fuertemente a los iones, lo que ocasiona que los electrones rara vez se muevan de un sitio a otro. El movimiento en este modelo está descrito como un “salto” entre distintos puntos de la red, se espera que si la separación entre los iones de la red aumenta la probabilidad de “saltar” tienda a cero. El parámetro usado para modelar este “salto” es llamado “hopping” o parámetro de acople. Dependiendo de la complejidad del sistema y sus características se pueden usar distintas aproximaciones para describir el parámetro de acople, como el “salto” a primeros vecinos (los puntos de red más cercanos) en donde los parámetros de acople son cero para cualquier otro tipo de vecino. En (TB) se suele trabajar con las funciones de Wannier, aunque el método se puede aplicar desde otras perspectivas (como la combinación lineal de orbitales atómicos). El parámetro de acople se determina experimentalmente y los resultados encontrados han mostrado un buen acercamiento con los estudios teóricos que a su vez se pueden hacer desde primeros principios usando la teoría de densidad funcional (DFT) [15, 16].

Con el descubrimiento de los superconductores que contienen hierro, se encontraron nuevos resultados que muestran comportamientos distintos a los mostrados por los cupratos [10, 17]. La superconductividad en sistemas con base en hierro es caracterizada por presentarse en más de una banda de energía por lo que se suele trabajar en teorías con dos bandas [18]. En ésta dirección se realizan trabajos para

explicar y analizar las características de la superconductividad para HTC y así encontrar modelos que ofrezcan resultados más acordes con las observaciones experimentales [19, 20], donde la periodicidad de la red toma un punto de interés.

En la teoría BCS el potencial de pares cumple una relación de auto-consistencia. El calculo de esta relación de auto-consistencia genera formas para este potencial como se muestra en [20], en particular si se utilizan funciones de Bloch como base, se obtiene que este potencial es periódico. Este aspecto ya ha sido estudiado por algunos autores, quienes encuentran resultados como la aparición de otras brechas y anisotropías en el espectro de energía [12]. Nuestro interés es extender estos trabajos para analizar en detalle los efectos de la periodicidad del potencial de pares cuando se consideran superconductores HTC. En éste trabajo nos centramos en la forma de la superficie de Fermi, debido a que los brechas superconductores aparecen sobre dicha superficie, que para los metales presentan diferentes formas [3]. Las superficies de Fermi son calculadas para varios valores de la energía de Fermi en el modelo de electrones cuasi-libres y TB, y es de nuestro interés analizar el comportamiento de la brecha superconductora sobre ésta superficie. Finalmente con ayuda del modelo de TB realizaremos una comparación con el modelo de electrones cuasi-libres, usando las distintas formas de las superficies de Fermi y las diferentes brechas que se pueden presentar en el espectro de energía.

Los capítulos de este trabajo están distribuidos entonces de la siguiente forma: En el primer capítulo se presenta el marco teórico, donde se mencionan los principales formalismos y aproximaciones que se han tenido en cuenta para el trabajo. En el capítulo 2 se muestra las deducciones de los hamiltonianos en la aproximación de electrones cuasi-libres [12] y se analiza la superficie de Fermi y las brechas que aparecen, para varios valores que concuerden con superconductores conocidos. Por último se presentan las conclusiones derivadas del trabajo y los anexos donde se profundiza en los detalles de los resultados obtenidos.

2. Marco teórico

2.1. Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes en el espacio real

En la formulación de Bogoliubov de-Gennes para un modelo que nos permite estudiar superconductores inhomogéneos, partimos de un Hamiltoniano en segunda cuantización donde hay una interacción atractiva entre electrones [11], dado por

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha} \int dr \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_F \right) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \int dr dr' \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\Psi}_{-\alpha}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (1)$$

El término $U(\mathbf{r})$ representa la interacción de los electrones con la red de iones del metal. El término $p^2/(2m)$ es la energía cinética de un electrón. El segundo término, es el potencial de atracción entre electrones, donde se está considerando que la interacción se da entre partículas de espín opuesto. La ecuación esta en segunda cuantización con lo cual $\hat{\Psi}_{\alpha}(r, t)$ es la función de campo del electrón.

Este Hamiltoniano es insoluble, por lo tanto, la estrategia es realizar una aproximación para el producto de cuatro operadores de campo, para ello hacemos una aproximación de campo medio dada por

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(r, t) \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(r', t) \hat{\Psi}_{-\alpha}(r', t) \hat{\Psi}_{\alpha}(r, t) \approx & \left\langle \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \right\rangle \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(r', t) \hat{\Psi}_{-\alpha}(r', t) \\ & + \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(r, t) \hat{\Psi}_{\alpha}(r, t) \left\langle \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{-\alpha}(\mathbf{r}', t) \right\rangle \\ & - \left\langle \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \right\rangle \left\langle \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{-\alpha}(\mathbf{r}', t) \right\rangle \\ & - \left\langle \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{-\alpha}(\mathbf{r}', t) \right\rangle \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(r', t) \hat{\Psi}_{\alpha}(r, t) \\ & \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(r, t) \hat{\Psi}_{-\alpha}(r', t) \left\langle \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \right\rangle \\ & + \left\langle \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{-\alpha}(\mathbf{r}', t) \right\rangle \left\langle \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \right\rangle \\ & + \left\langle \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \right\rangle \hat{\Psi}_{-\alpha}(r', t) \hat{\Psi}_{\alpha}(r, t) \\ & + \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(r, t) \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(r', t) \left\langle \hat{\Psi}_{-\alpha}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \right\rangle \\ & - \left\langle \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \right\rangle \left\langle \hat{\Psi}_{-\alpha}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \right\rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

Los términos constantes (productos de dos valores esperados) son absorbidos en la energía del estado

base, con lo cuál de los nueve términos presentes solo quedan seis. Los primeros cuatro corresponden al potencial de Hartree-Fock y los responsables de la superconductividad. El potencial de Hartree-Fock, el cual nos da cuenta del potencial promedio que actúa sobre un electrón debido a los demás electrones, está dado por los siguientes promedios

$$U_H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle \hat{\Psi}_{-\beta}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{-\beta}(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (3)$$

$$U_{HF}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = -V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \langle \hat{\Psi}_{\beta}^\dagger(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{-\beta}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (4)$$

El potencial en (3) se denomina de Hartree y corresponde a la interacción promedio de un electrón por los demás; y el segundo potencial se denomina de intercambio y es debido al principio de exclusión de Pauli.

El potencial de pares de superconductividad Δ se define como el siguiente promedio

$$\Delta(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) = -\beta V(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \langle \hat{\Psi}_{-\beta}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}', t) \rangle. \quad (5)$$

En superconductividad el estado BCS no tiene un número fijo de partículas y el valor esperado $\langle \hat{\Psi}_{-\beta}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}', t) \rangle$ es proporcional al número de electrones apareados o pares de Cooper.

Los potenciales U_{HF} y Δ son potenciales autoconsistentes, es decir, se necesitan calcular los promedios resolviendo las ecuaciones y a su vez para resolver las ecuaciones se necesitan estos potenciales. Este problema cíclico se inicia suponiendo una forma de potencial. Es importante señalar que en estas ecuaciones se puede tener cierta periodicidad, dependiendo del tipo de potencial $V(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ considerado. En los casos usuales es un potencial de contacto, con lo cual automáticamente se puede mostrar que el potencial es periódico, sin embargo, no es del todo necesario tener el potencial de contacto [ver anexo A¹.]

Las definiciones (3) y (5) permiten escribir al Hamiltoniano (1) en la aproximación de campo medio como

¹En el anexo A se pretende hacer un acercamiento a los casos donde este potencial es periódico, partiendo del mismo hecho de un cambio suave, es decir, las funciones de onda del material corresponden a funciones de Bloch.

$$\hat{H} \approx \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t) - E_F \right) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \quad (6)$$

$$\begin{aligned} & - \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' (U_H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) - U_{HF}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t)) \quad (7) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \left\{ \Delta(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{-\alpha}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) + \Delta^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) \hat{\Psi}_{-\alpha}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{r}, t) \right\}. \end{aligned}$$

Este Hamiltoniano es cuadrático en el producto de operadores de campo, y para su diagonalización escribimos la ecuaciones de movimiento $\hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r})$ del operador de campo en la imagen de Heissenberg

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}) &= [\hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}), \hat{H}]_- = \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t) - E_F \right) \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}, t) \\ & - \int d\mathbf{r}' U_H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}, t) \\ & - \int d\mathbf{r}' U_{HF}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \hat{\Psi}_{-\beta}(\mathbf{r}', t) \\ & + \beta \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}', \mathbf{r}, t) \left(\hat{\Psi}_{-\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}', t) \right). \quad (8) \end{aligned}$$

Tanto las ecuaciones de movimiento como el Hamiltoniano han sido ampliamente estudiadas sin el potencial de la red de iones [11],[8]. La forma usual de solucionar el problema se puede aplicar de forma similar, la cual es realizar una transformación de Bogoliubov dada por

$$\hat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}, t) = \sum_n \left[u_n(\mathbf{r}, t) \hat{\gamma}_{n,\beta} + \beta v_n^*(\mathbf{r}, t) \hat{\gamma}_{n,-\beta}^{\dagger} \right] \quad (9)$$

$$\hat{\Psi}_{-\beta}^{\dagger}(\mathbf{r}, t) = \sum_n \left[u_n^*(\mathbf{r}, t) \hat{\gamma}_{n,-\beta}^{\dagger} - \beta v_n(\mathbf{r}, t) \hat{\gamma}_{n,\beta} \right]. \quad (10)$$

Esta transformación canónica nos permite estudiar los estados excitados del sistema obteniendo dos ecuaciones para $u_n(\mathbf{r}, t)$ y $v_n(\mathbf{r}, t)$ como

$$\hat{H} = E_0 + \sum_n E_n \hat{\gamma}_{n,\alpha}^{\dagger} \hat{\gamma}_{n,\alpha}, \quad (11)$$

donde E_0 es la energía del estado base y E_n es la energía de una excitación del estado n ; y $\hat{\gamma}_{n,\alpha}^{\dagger}/\hat{\gamma}_{n,\alpha}$ son los operadores que crean/destruyen una cuasi-partícula en el estado n . Para que la transformación (9) y (10) diagonalice el Hamiltoniano, u_n y v_n deben cumplir las siguientes relaciones

$$i\hbar\partial_t u_n(\mathbf{r}, t) = \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t) - E_F \right) u_n(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') v_n(\mathbf{r}', t) \quad (12)$$

$$i\hbar\partial_t v_n(\mathbf{r}, t) = - \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t) - E_F \right) v_n(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u_n(\mathbf{r}', t), \quad (13)$$

Donde se ha tomado el potencial de Hartree-Fock como cero ².

Estas dos ecuaciones son llamadas las ecuaciones de Bogoliubov de-Gennes. Cuando el potencial $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ es cero y las funciones $u_n(\mathbf{r}, t)$ y $v_n(\mathbf{r}, t)$ describen el comportamiento de los electrones y huecos en los metales respectivamente. Cuando el potencial de pares no es cero el espinor formado por $\begin{pmatrix} u_n(\mathbf{r}, t) \\ v_n(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}$ corresponde al estado excitado electrón-hueco los que se obtienen al romper un par de Cooper. Las soluciones son usualmente obtenidas cuando $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ es homogéneo, que corresponde a $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Delta\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ en nuestra representación. Es de considerar que el potencial de pares está dado por la siguiente ecuación de auto-consistencia

$$\begin{aligned} \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) &= -V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left\langle \widehat{\Psi}_{-\beta}(\mathbf{r}', t) \widehat{\Psi}_{\beta}(\mathbf{r}, t) \right\rangle \\ &= -V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_n (u_n(\mathbf{r}', t) v_n^*(\mathbf{r}, t) (1 - f_n) - v_n^*(\mathbf{r}', t) u_n(\mathbf{r}, t) f_n). \end{aligned} \quad (14)$$

Nuestro punto de interés será considerar el potencial de pares periódico, este depende tanto de las funciones $u_n(\mathbf{r}, t)$, $v_n(\mathbf{r}, t)$ y del potencial de interacción. Las funciones que solucionan las ecuaciones de movimiento con un potencial periódico son las funciones de Bloch, y por lo tanto para responder ésta pregunta será necesario examinar el teorema de Bloch y donde consideraremos especialmente dos métodos para resolver el problema.

2.2. Teorema de Bloch y aproximación de electrones cuasi-libres

En los modelos utilizados en el estudio de bandas de energía en los metales es usual considerar que el sistema está descrito por electrones independientes y un potencial externo producido por los iones de la red, el cual es periódico. El Hamiltoniano para los electrones está dado en segunda cuantización como

$$\widehat{H}_B = \int dr \widehat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_F \right) \widehat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (15)$$

²El término de Hartree-Fock es usado en [21], donde se encuentra que variando el dopaje se puede obtener valores despreciables de éste potencial respecto al potencial de superconductividad.

y ahora para usar la base de Bloch se procederá a realizar la siguiente transformación para las funciones de onda

$$\widehat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \widehat{c}_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (16)$$

donde las funciones $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ corresponden a las funciones de Bloch, con lo cual tenemos que el Hamiltoniano (15) puede ser descrito como:

$$\begin{aligned} \widehat{H}_B &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \widehat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \widehat{c}_{\mathbf{k}'} \int d\mathbf{r} \varphi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_F \right) \varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \sigma'} h_{\mathbf{k}} \widehat{c}_{\mathbf{k}}^\dagger \widehat{c}_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (17)$$

con

$$h_{\mathbf{k}} = \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_F \right). \quad (18)$$

Nuestro objetivo es la solución del Hamiltoniano, éste tiene la propiedad de ser invariante ante traslaciones. Para un cristal infinito se puede pensar que si movemos el cristal cierta distancia en una dirección entonces el cristal sigue siendo el mismo, la dirección en la que se realiza el desplazamiento del cristal será tal que $U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)$, donde \mathbf{R}_n corresponde al vector de la red de Bravais. Con ésta consideración las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger para los electrones dentro del cristal se pueden escribir como

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \phi(\mathbf{r}). \quad (19)$$

El teorema de Bloch establece que las funciones $\phi(\mathbf{r})$ son periódicas, con la periodicidad de la red. Los vectores \mathbf{k} son vectores que junto con la energía caracterizan las funciones de onda. Se puede ver que si para la funciones de onda se suma un vector tal que coincide con la periodicidad de $\phi(\mathbf{r})$ se obtiene

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}). \quad (20)$$

El potencial $U(r)$ y la función de onda se puede expandir en una serie de Fourier como,

$$U(\mathbf{r}) = \sum_m U(\mathbf{K}_m) e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}}, \quad (21)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \sum_m u(\mathbf{K}_m) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}}, \quad (22)$$

donde se ha usado como factor de normalización el volumen de la celda primitiva V . Usando el Hamiltoniano (18) y las ecuaciones (21) (22), obtenemos

$$\frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \left(\sum_m \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_m)^2 u(\mathbf{K}_m) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} + \sum_{l,m} V(\mathbf{K}_l) u(\mathbf{K}_m) e^{i(\mathbf{K}_m + \mathbf{K}_l)\cdot\mathbf{r}} \right) = E \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V}} \sum_m u(\mathbf{K}_m) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}}. \quad (23)$$

Integrando sobre el volumen de la celda primitiva y usando la relación de ortogonalidad dada por $1/V \int e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{K}_n\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \delta_{\mathbf{K}_m, \mathbf{K}_n}$ obtenemos

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_n)^2 - E_F \right) u(\mathbf{K}_n) + \sum_m U(\mathbf{K}_n - \mathbf{K}_m) u(\mathbf{K}_m) = E u(\mathbf{K}_n), \quad (24)$$

esta ecuación es válida para cada valor de \mathbf{K}_n , de tal manera que tenemos igual número de incógnitas $u(\mathbf{K}_n)$ que de ecuaciones, recordando que $n = 0, 1, 2, \dots$

Si el potencial de la red de iones es cero, la energía E está dada por $E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E_F$ ésta será lo solución del sistema sin perturbar. Ahora si el potencial de la red de iones es pequeño respecto a la energía cinética del electrón, es necesario considerar teoría de perturbaciones a primer orden. En ese punto el vector de onda \mathbf{K}_n posee como solución la energía a orden cero dada por $E = \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k}^2 - E_F$ y cuando $U(\mathbf{K}_n)$ es distinto de cero tenemos el estado dado por

$$u(\mathbf{K}_n) = - \frac{2mU(\mathbf{K}_n)}{\hbar^2 \left((\mathbf{k} + \mathbf{K}_n)^2 - \mathbf{k}^2 \right)} u(0), \quad (25)$$

$u(\mathbf{K}_n)$ diverge cuando $\left((\mathbf{k} + \mathbf{K}_n)^2 = \mathbf{k}^2 \right)$.

Esta condición ocurre en un plano que se denomina plano de Bragg debido a que la condición se puede escribir como la ecuación de un plano ubicado en la mitad del vector de la red recíproca y con vector normal \mathbf{K}_n ,

$$\mathbf{K}_n \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{K}_n/2) = 0. \quad (26)$$

Para estos puntos es necesario usar una aproximación al siguiente orden, esta corrección divide al espectro de energía en dos bandas alrededor de los planos de Bragg.

Los términos son sólo validos siempre y cuando no estemos en los planos de Bragg, para examinar el espectro de energía cerca a un plano tenemos que usar el siguiente orden de teoría de perturbaciones. En este caso tenemos que incluir un nuevo término a la expansión que llamamos p , con esto, la ecuación en donde se tienen infinitos términos para distintos valores de n solo dos se consideran significativos uno para $\mathbf{K}_n = 0$ y otra para $\mathbf{K}_n = \mathbf{K}_p$. Los términos correspondientes al segundo orden en la expansión de la funciones de Bloch están dados por la siguiente ecuación

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k}|^2 - E - E_F \right) u(\mathbf{0}) + V(-\mathbf{K}_p) u(\mathbf{K}_p) = 0 \quad (27)$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_p|^2 - E - E_F \right) u(\mathbf{K}_p) + V(\mathbf{K}_p) u(\mathbf{0}) = 0. \quad (28)$$

Al resolver el sistema de ecuaciones buscamos soluciones no triviales para $u(\mathbf{0})$ y $u(\mathbf{K}_p)$, lo cual se logra cuando la energía está dada por

$$E(k) = \varepsilon_+(\mathbf{k}) \pm \left\{ \left(V_{\mathbf{K}_p}^2 + \varepsilon_-^2(\mathbf{k}) \right) \right\}^{1/2}, \quad (29)$$

con

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p} = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{K}_p|^2 - E_F \quad (30)$$

y

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p} \pm \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}. \quad (31)$$

Evaluando la energía en la condición de Bragg obtenemos que

$$E(\mathbf{K}_p) = \varepsilon(\mathbf{K}_p/2) \pm |V_{\mathbf{K}_p}|, \quad (32)$$

con lo cual obtenemos que la brecha de energía o gap es dada por

$$\Delta E(\mathbf{K}_p) = 2 |V_{\mathbf{K}_p}|. \quad (33)$$

a partir de esta condición se realiza la figura 1.

Para calcular la superficie de Fermi en un metal como se muestra en [3], se debe resolver la ecuación

$$E_n(k) - E_F = 0, \quad (34)$$

siendo $E_n(k)$ la energía de la n-ésima banda. En nuestro caso al tener la energía de la banda referenciada a la energía de Fermi solamente debemos igualar la energía dada en (32) a cero.

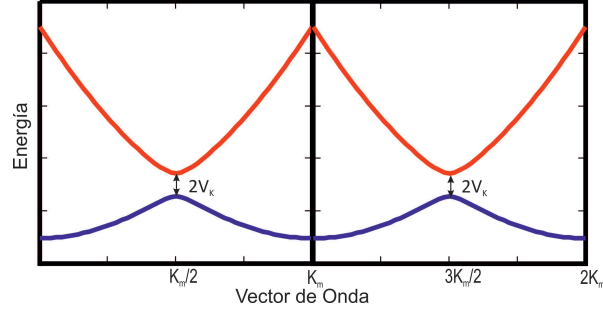


Figura 1: El espectro de energía de un metal está dado por varias bandas las cuales se obtienen al considerar los distintos cruces de las parábolas de los electrones. La periodicidad genera una repetición de estas, en la figura se observa dos de estas bandas y el valor de la brecha.

Para entender cómo es la superficie de Fermi en un metal pensemos en el caso unidimensional, en este caso cerca a un plano de Bragg la ecuación (34) se puede escribir como

$$\varepsilon_k \varepsilon_{k+K_p} - V_{K_p}^2 = 0, \quad (35)$$

con ε_k dada por la definición (30).

La superficie de Fermi es entonces vista dependiendo de que tan cerca estamos a un plano de Bragg. Para observar esto comencemos por un caso en el que no tengamos la red periódica con lo cual $\varepsilon_k = E_F$, en este caso obtenemos que la solución es una esfera mostrada en la figura 2 (a). El hecho de tener la red periódica coloca más esferas que corresponden a cada vector como se muestra en 2 (b). El radio de la esfera de Fermi puede hacer que éstas esferas se conecten como se muestra en 2(c) y (d), en cada uno de estos casos se hace necesario resolver la ecuación (35), y obtener las correcciones a la superficie de Fermi que corresponden a la parte gris de la figura 2. Podemos apreciar que en el caso (c) tenemos que no existe superficie de Fermi sobre el eje k_x debido a la periodicidad, mientras en (d) tenemos un ovalo interno y una envolvente de los óvalos que no es una curva cerrada.

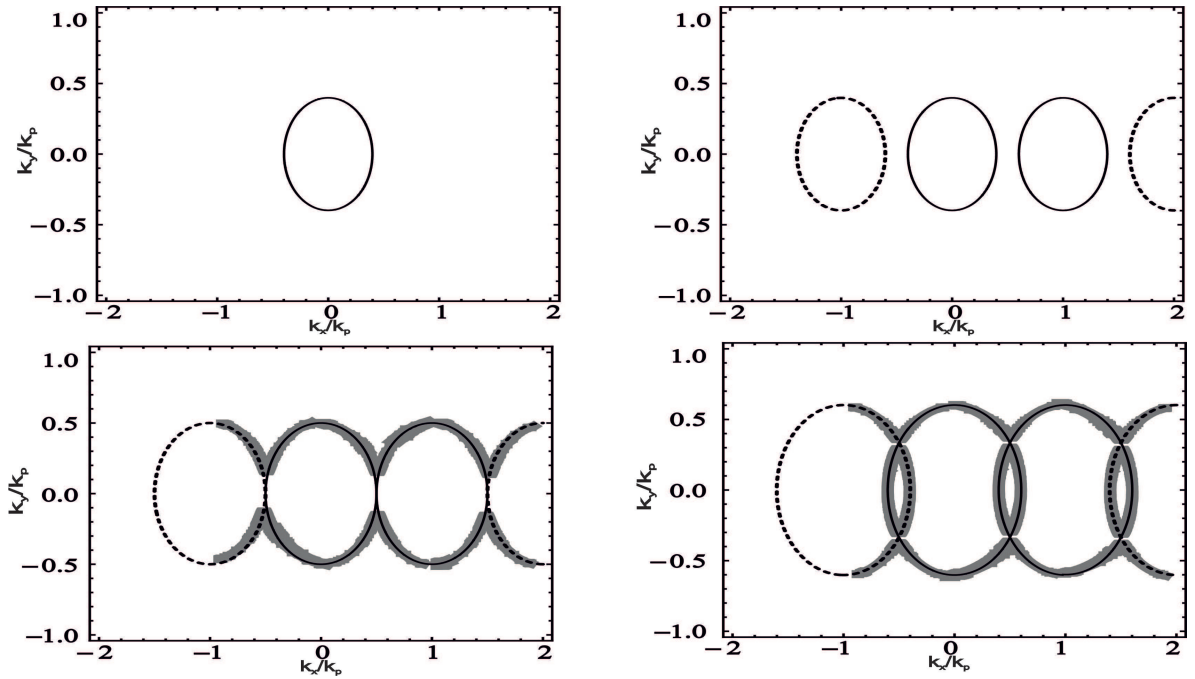


Figura 2: Las superficies de Fermi dependen de la comparación del valor del vector de la red recíproca respecto al valor del vector de Fermi, (a) En el caso de no tener una red periódica la superficie de Fermi es una esfera de radio igual el vector de Fermi. (b) La inclusión de la periodicidad de la red introduce más esferas para cada punto de red los cuales se pueden deformar cuando se encuentran con otras esferas produciendo una separación gris (c) y (d). El superficie de Fermi sera en este caso la envolvente gris.

2.3. Modelo “Tight Binding”

El teorema de Bloch hace uso de la periodicidad de la red para describir el problema en términos de funciones periódicas, teniendo en cuenta esto la aproximación de electrones cuasi-libres mencionada anteriormente no es la única que se puede realizar, por ejemplo pensemos que los iones de la red atraen suficientemente fuerte a los electrones, los electrones entonces estará ligados a los átomos de la red y rara vez pasaran de un átomo a otro. Cuando un electrón pasa entre átomos decimos que él ha “saltado”, este salto está relacionado con un término de “hopping” o parámetro de acople. Para realizar entonces este modelo será necesario pasar a una base donde los electrones estén descritos por funciones de onda localizadas en cada uno de estos átomos, la transformación estará definida por

$$\hat{c}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \hat{c}_i, \quad (36)$$

siendo $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}$ el operador definido en la base de Bloch, y N el numero de sitios de red. La razón de esto es que las funciones de Bloch también son periódicas en el espacio reciproco por lo cual se puede realizar una transformación de Fourier usando los sitios de red \mathbf{R}_i . En esta base se tiene que los operadores \hat{c}_i^\dagger crean electrones en los sitios de red i , mientras \hat{c}_i destruyen electrones en los sitios de red i .

Aplicando ésta transformación a (17) obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{H}_t &= \sum_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{i'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{i'}} \hat{c}_{i',\sigma} \\ &= \sum_{i,i'} t_{i,i'} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i'}, \end{aligned}$$

con $t_{i,i'} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} h_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{i'}}$. En un modelo completo de transporte sin considerar interacciones entre electrones tendríamos todos las formas posibles de movimientos de electrones, pero es de esperar que éstas decrezcan con la distancia, es decir que si un electrón es destruido y creado en sitios muy alejados, el valor de $t_{i,i'}$ sea casi cero. Una de las aproximaciones es considerar que los electrones pasen a sitios cercanos unicamente. En una red de Bravais tenemos entonces varios tipos de vecinos, la aproximación usada para el presente trabajo es a primeros vecinos.

El modelo (TB) estará definido por los operadores de creación y destrucción en cada sitio de la red, los cuales estarán definidos por las funciones de Wannier. Éstas funciones se encuentran localizadas en cada sitio de la red y están dadas por

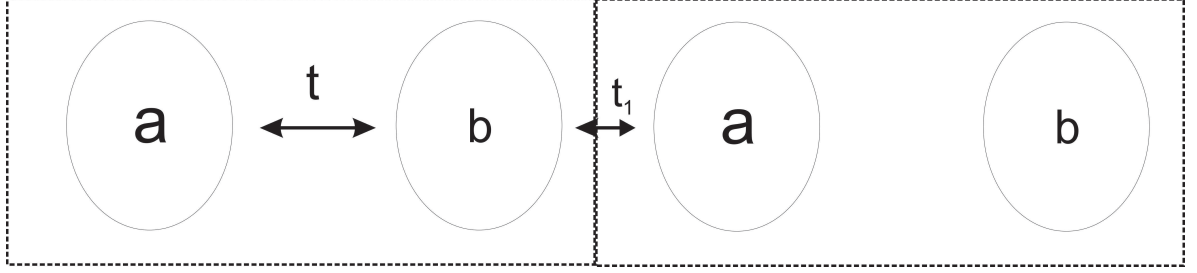


Figura 3: Red unidimensional de dos motivos a y b , el cuadrado rectangular muestra la celda primitiva y usamos dos parametros de acople para enlazar los átomos a y b . La distancia entre los centros de las dos celda primitivas es d .

$$W_k(k, r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} U_i(k, r), \quad (37)$$

siendo $U_i(k, r)$ funciones de Bloch.

Los métodos para obtener los valores del parámetro de acople y la energía de punto cero, pueden ser experimentales o de primeros principios como DFT [16]. También se considera calcular integrales con los orbitales atómicos para la escogencia de los valores. Los parámetros de acople son obtenidos por el enlazamiento de estos orbitales y se requiere a su vez integrales de estos dos orbitales. También se puede considerar modelos donde hay más de dos orbitales entre dos átomos que se están entrelazando por ejemplo acoples entre dos átomos a a través de orbitales s con p y s con d [22].

En el modelo se deben incluir los átomos y orbitales a considerar en la red de Bravais, así como la cantidad de vecinos en la aproximación, por ejemplo podemos tener una red lineal de dos átomos distintos a y b , y sólo una unión a través de dos orbitales que produzcan los parámetros de acople t y t_1 respectivamente, como se muestra en la siguiente figura 3.

En este ejemplo el Hamiltoniano Tight-Binding será

$$\hat{H}_{tb} = \sum_i t_a \hat{c}_{a,i}^\dagger \hat{c}_{a,i} + \sum_i t_b \hat{c}_{b,i}^\dagger \hat{c}_{b,i} + \sum_i t \hat{c}_{a,i}^\dagger \hat{c}_{b,i} + \sum_i t \hat{c}_{b,i}^\dagger \hat{c}_{a,i} + \sum_i t_1 \hat{c}_{a,i+1}^\dagger \hat{c}_{b,i} + \sum_i t_1 \hat{c}_{b,i}^\dagger \hat{c}_{a,i+1}. \quad (38)$$

Para obtener el espectro de energía procedemos a realizar una transformación inversa a la base de Bloch usando ,

$$\hat{c}_{a,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \hat{c}_{a,\mathbf{k}} \quad (39)$$

$$\hat{c}_{b,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \hat{c}_{b,\mathbf{k}}. \quad (40)$$

Con esto aplicado a (38), se encuentra el siguiente Hamiltoniano en la base de Bloch donde se ha usado las relaciones de ortogonalidad $\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{i}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$, además $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{i+1}} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}}$

$$\hat{H}_B = \sum_{\mathbf{k}} t_a \hat{c}_{a,\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{a,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} t_b \hat{c}_{b,\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{b,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} t \hat{c}_{a,\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{b,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} t \hat{c}_{b,\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{a,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} t_1 \hat{c}_{a,\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{b,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} t_1 \hat{c}_{b,\mathbf{k}}^\dagger \hat{c}_{a,\mathbf{k}}. \quad (41)$$

El cual podemos escribir en forma matricial como

$$\hat{H}_B = \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}_{a,k}^\dagger & \hat{c}_{b,k}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_a & t + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}} t_1 \\ t + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}} t_1 & t_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{a,k} \\ \hat{c}_{b,k} \end{pmatrix} \quad (42)$$

Para obtener el espectro de energía se diagonaliza el Hamiltoniano, encontrando los valores propios para el espectro de energía,

$$E^2 - (t_a + t_b)E + t_a t_b - t^2 - t_1^2 - 2tt_1 \cos[kd] = 0. \quad (43)$$

Con lo cual se encuentran dos bandas dadas por

$$E = \frac{(t_a + t_b)}{2} + \sqrt{\frac{(t_a - t_b)^2}{4} + t^2 + t_1^2 + 2tt_1 \cos[kd]} \quad (44)$$

$$E = \frac{(t_a + t_b)}{2} - \sqrt{\frac{(t_a - t_b)^2}{4} + t^2 + t_1^2 + 2tt_1 \cos[kd]}. \quad (45)$$

En la figura 4 se observan las dos bandas de energía, entre estas dos bandas aparece una brecha de energía cuando kd sea un múltiplo entero de 2π de valor

$$\Delta E = |t_a - t_b| \quad (46)$$

2.4. Superconductividad en sistemas periódicos

Cuando se considera superconductividad, es necesario tener en cuenta las interacciones atractivas entre los electrones, además de los espines como se hizo inicialmente. Esto permite extender el Hamiltoniano dado en (1), a una formulación en la base de Bloch considerando que el potencial de pares obtiene una forma periódica, con la siguiente transformación

$$\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \quad (47)$$

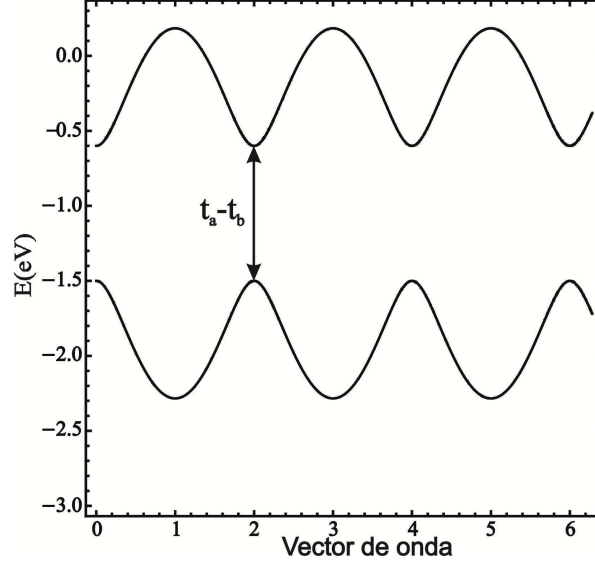


Figura 4: Espectro de energía en la aproximación “Tight Binding” para un sistema de dos motivos de una red unidimensional. Las bandas son calculadas usando los parámetros del problema que se tratara para el superconductor con lo cual $t = -t_1 = 0,57\text{eV}$, $t_a = -0,6\text{eV}$ y $t_b = -1,5\text{eV}$. En este modelo solo se obtienen dos bandas entre las cuales solo aparece una brecha de energía

$$\hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \quad (48)$$

donde tenemos que las funciones $\phi_{\mathbf{k},\sigma}$ satisfacen el teorema de Bloch sin el potencial de interacción de igual manera el operador $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$ corresponde al que se usa en la base de Bloch respectivamente. Al reemplazar en (1) se obtiene un Hamiltoniano en la base de Bloch como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} h_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} - 1/2 \sum_{\alpha\beta} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',1,1'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',1,1'} \hat{c}_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}',\beta}^\dagger \hat{c}_{1,\beta} \hat{c}_{1,\alpha}, \quad (49)$$

siendo $h_{\mathbf{k}} = \int d\mathbf{r}' \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t) - E_F \right) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.

El potencial de interacción queda definido como

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',1,1'} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_1(\mathbf{r}) \phi_{1'}(\mathbf{r}). \quad (50)$$

teniendo en cuenta que la interacción sólo involucra electrones con momentum y espín opuestos consideramos el potencial como $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}',1,1'} = \delta_{\mathbf{k}',-1} \delta_{\mathbf{k},-1'}$ obteniendo

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} h_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}', \sigma} - 1/2 \sum_{\alpha \beta} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}, \alpha}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}', \beta}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}', \beta} \hat{c}_{-\mathbf{k}, \alpha}. \quad (51)$$

Con este nuevo Hamiltoniano se realiza de nuevo una aproximación de campo medio para los operadores de destrucción electrónicos $\hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}$. Para obtener una notación uniforme se realiza las definiciones de $\mathbf{k} \uparrow = \mathbf{k}$ y $-\mathbf{k} \downarrow = -\mathbf{k}$, debido a que en la suma se encuentran todos los posibles valores del vector de onda; y al despreciar el potencial de Hartree-Fock el Hamiltoniano anterior se puede escribir como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k} \sigma} h_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k} \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}' \sigma} - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\langle \hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle \hat{c}_{-\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'} + \hat{c}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'} \rangle \right). \quad (52)$$

Con esto se puede definir el siguiente potencial de pares

$$\Delta_{\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}, +}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}, -}^{\dagger} \rangle. \quad (53)$$

El potencial Δ anterior es el más general que se puede construir en la base de Bloch con la única suposición de una interacción entre electrones de momento y espín opuestos (estados singletes). Este potencial tiene la característica de no conmutar con el operador numero de partículas. Nuevamente el objetivo es realizar una transformación de Bogoliubov de tal manera que para simplificar el problema definimos dos nuevos operadores de la siguiente manera

$$\hat{c}_{\mathbf{k}, +}^{\dagger} = u_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}, +}^{\dagger} + v_{-\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}, -} \quad (54)$$

$$\hat{c}_{-\mathbf{k}, -}^{\dagger} = u_{-\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{-\mathbf{k}, -}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}, +}. \quad (55)$$

Con estos operadores se obtiene la siguiente relación de auto-consistencia para el potencial Δ

$$\Delta_{\mathbf{k}'}^* = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* (1 - 2f_{\mathbf{k}}), \quad (56)$$

donde $f_{\mathbf{k}}$ es la función de distribución de Fermi para los electrones con vector de onda \mathbf{k} .

2.5. Ecuaciones de Bogoliubov de-Gennes en el modelo “Tight Binding”

Partiremos de los resultados anteriores para estudiar las ecuaciones de Bogoliubov de-Gennes en un modelo “Tight Binding” (BdG-TB); Tenemos un Hamiltoniano en la base de Bloch (49) y una

transformación para la base de Wannier dada en (36), combinadas podemos obtener un Hamiltoniano “Tight Binding” con interacciones entre los electrones como

$$H = \sum_{k,\sigma} h_k \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{i,\sigma}^\dagger \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} c_{j,\sigma} + \frac{1/2}{V^2} \left(\sum_{\alpha\beta} \sum_{k,k',l,l'} V_{k,k',l,l'} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{i,\alpha}^\dagger \sum_m e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_m} c_{m,\beta}^\dagger \right. \quad (57)$$

$$\left. \sum_j e^{-i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{R}_j} c_{j,\beta} \sum_n e^{-i\mathbf{k}'''\cdot\mathbf{R}_n} c_{n,\alpha} \right), \quad (58)$$

y usando las siguientes definiciones

$$t_{i,j} = \sum_k h_k \frac{1}{V} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad (59)$$

$$V_{i,m,j,n} = \frac{1}{V^2} \sum_{k,k',k'',k'''} V_{k,k',k'',k'''} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_m} e^{-i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{k}'''\cdot\mathbf{R}_n}, \quad (60)$$

obtenemos

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + 1/2 \sum_{\alpha\beta} \sum_{i,m,j,n} V_{i,m,j,n} c_{i,\alpha}^\dagger c_{m,\beta}^\dagger c_{j,\beta} c_{n,\alpha} \quad (61)$$

El anterior Hamiltoniano sería una forma general de una interacción periódica en el modelo TB con las mismas suposiciones dadas en el Hamiltoniano dado en la base de Bloch [22]. Realizaremos con la interacción de cuatro operadores una aproximación de campo medio similar a lo realizado anteriormente, la cual es dada por

$$\begin{aligned} c_{i,\alpha}^\dagger c_{m,\beta}^\dagger c_{j,\beta} c_{n,\alpha} &\approx c_{i,\alpha}^\dagger c_{n,\alpha} \langle c_{m,\beta}^\dagger c_{j,\beta} \rangle + c_{m,\beta}^\dagger c_{j,\beta} \langle c_{i,\alpha}^\dagger c_{n,\alpha} \rangle \\ &- \langle c_{m,\beta}^\dagger c_{j,\beta} \rangle \langle c_{i,\alpha}^\dagger c_{n,\alpha} \rangle - c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\beta} \langle c_{m,\beta}^\dagger c_{n,\alpha} \rangle \\ &- c_{m,\beta}^\dagger c_{n,\alpha} \langle c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\beta} \rangle + \langle c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\beta} \rangle \langle c_{m,\beta}^\dagger c_{n,\alpha} \rangle \\ &+ \langle c_{i,\alpha}^\dagger c_{m,\beta}^\dagger \rangle c_{j,\beta} c_{n,\alpha} + \langle c_{j,\beta} c_{n,\alpha} \rangle c_{i,\alpha}^\dagger c_{m,\beta}^\dagger - \langle c_{i,\alpha}^\dagger c_{m,\beta}^\dagger \rangle \langle c_{j,\beta} c_{n,\alpha} \rangle. \end{aligned}$$

En ésta aproximación es posible identificar términos de Hartree-Fock y otros que corresponden a la superconductividad. Los términos relacionados a superconductividad están dado por

$$H_s = 1/2 \sum_{\alpha\beta} \sum_{i,m,j,n} V_{i,m,j,n} \left(\langle c_{i,\alpha}^\dagger c_{m,\beta}^\dagger \rangle c_{j,\beta} c_{n,\alpha} + \langle c_{j,\beta} c_{n,\alpha} \rangle c_{i,\alpha}^\dagger c_{m,\beta}^\dagger \right),$$

en la suma de todos los espines sólo se consideran los que tienen espines opuestos, por lo que el Hamiltoniano anterior de interacción está dado por

$$\begin{aligned}
H_s = & 1/2 \sum_{i,m,j,n} V_{i,m,j,n} \left(\langle c_{i,\uparrow}^\dagger c_{m,\downarrow}^\dagger \rangle c_{j,\uparrow} c_{n,\downarrow} + \langle c_{j,\uparrow} c_{n,\downarrow} \rangle c_{i,\uparrow}^\dagger c_{m,\downarrow}^\dagger \right) \\
& + \left(\langle c_{i,\downarrow}^\dagger c_{m,\uparrow}^\dagger \rangle c_{j,\downarrow} c_{n,\uparrow} + \langle c_{j,\downarrow} c_{n,\uparrow} \rangle c_{i,\downarrow}^\dagger c_{m,\uparrow}^\dagger \right)
\end{aligned}$$

Entonces el potencial de pares queda determinado por la siguiente relación de auto recurrencia

$$\Delta_{j,n}^* = \sum_{i,m} V_{i,m,j,n} \langle c_{i,\uparrow}^\dagger c_{m,\downarrow}^\dagger \rangle. \quad (62)$$

para escribir el Hamiltoniano usando esta nueva definición de Δ , se realiza un intercambio de índices y se aplica las relaciones de anticonmutación de los operadores obteniendo el siguiente Hamiltoniano efectivo

$$H = \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma'} + \sum_{i,j} (\Delta_{i,j}^* c_{i,\uparrow} c_{j,\downarrow} + \Delta_{i,j} c_{i,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger). \quad (63)$$

Es importante mencionar que en el modelo no se consideran fenómenos magnéticos, lo cual se ha logrado al hacer los promedios de productos que crean un par de Cooper en dos sitios, iguales; sin importar donde se crea el electrón de espín negativo.

3. Superconductividad en la aproximación de electrones cuasi-libres

En este capítulo vamos a estudiar un modelo de superconductividad en el cual tengamos un potencial de pares periódico. Para este problema consideraremos no solo un potencial de pares periódico, sino la inclusión del potencial de la red en el problema. Este tipo de problemas es similar al caso de los metales desde el punto de vista que el Hamiltoniano cumple el teorema de Bloch, es por ésto que se puede analizar inicialmente en un modelo donde la interacción de los electrones con la red de iones sea pequeña. El incluir el potencial de la red en el Hamiltoniano nos acercarnos a modelos mas reales para la superconductividad, y a su vez logramos mejorar la aproximación usual BCS. El tener una superficie de Fermi mas compleja de la que ofrece un Hamiltoniano sin potencial de red nos logra adentrar a diversos casos que podrían permitir caracterizar un material y realizar predicciones. Para este problema se deben entonces analizar varios casos antes de adentrarnos en problemas mas reales, por lo tanto estudiaremos efectos de varios tipos de dispersiones posibles, las cuales debida al potencial de pares periódico cambian el espectro de energía de los superconductores.

3.1. Ecuaciones de Bogoliubov de-Gennes en la aproximación de electrones cuasilibres.

Al igual que en el proceso de electrones cuasi-libres partimos de la ecuación (6) y realizamos una expansión de todos los potenciales. Primero supondremos que el potencial de pares es periódico tal como lo es el de la red de iones, esto con las restricciones obtenidas en el anexo A. Además sabemos que si el potencial de la red de iones no depende explícitamente del tiempo las soluciones de las ecuaciones son de la forma

$$\begin{pmatrix} u(\mathbf{r}, \mathbf{t}) \\ v(\mathbf{r}, \mathbf{t}) \end{pmatrix} = e^{-iEt/\hbar} \begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (64)$$

donde $\begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$ representa el espinor del estado excitado. Las ecuaciones de movimiento de los operadores dados en (12) y (13) quedan como

$$Eu(\mathbf{r}) = \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_F \right) u_n(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') v_n(\mathbf{r}') \quad (65)$$

$$Ev(\mathbf{r}) = - \left(\frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - E_F \right) v_n(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u(\mathbf{r}'). \quad (66)$$

En estas ecuaciones tenemos dos potenciales periódicos $U(\mathbf{r})$ y $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, supondremos entonces que las soluciones de las ecuaciones son de la forma dada por el teorema de Bloch

$$\begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} \\ v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} \end{pmatrix}, \quad (67)$$

donde \mathbf{K} es el vector de la red recíproca, al reemplazar ésto en las ecuaciones (65) y (66) obtenemos

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{K}_m} H_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} + \sum_{\mathbf{K}_m} \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}'} v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} &= E \sum_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} \quad (68) \\ - \sum_{\mathbf{K}_m} H_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} + \sum_{\mathbf{K}_m} \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \Delta^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}'} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} &= E \sum_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m}, \end{aligned} \quad (69)$$

donde se ha definido

$$H_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left(\frac{\hbar^2 |\mathbf{k} + \mathbf{K}_m|^2}{2m} - E_F \right). \quad (70)$$

Las integrales las podemos escribir como

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}'} &= \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{K}_m\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} \\ &= \left(\int d\mathbf{s} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_m)\cdot\mathbf{s}} \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R}) \right) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} \\ &= \Delta(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m, \mathbf{R}) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}}. \end{aligned}$$

Donde se ha realizado el siguiente cambio de coordenadas

$$\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}', \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2} \quad (71)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} + \frac{\mathbf{s}}{2}, \mathbf{r}' = \mathbf{R} - \frac{\mathbf{s}}{2}, \quad (72)$$

las cuales se pueden ver como una transformación al centro de masa del par de Cooper. El teorema de Bloch también establece que las funciones de onda son periódicas en el espacio de los momentos, con lo cual se podrá obtener que $\Delta(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m, \mathbf{R}) = \Delta(\mathbf{k}, \mathbf{R})$ resultado mostrado en el anexo A. De forma similar se obtiene

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \Delta^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}'} &= \Delta^*(-\mathbf{k} - \mathbf{K}_m, \mathbf{R}) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} \\ &= \Delta^*(\mathbf{k}, \mathbf{R}) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}}. \end{aligned}$$

con lo cual las ecuaciones de movimiento quedan

$$\sum_{\mathbf{K}_m} H_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} + \sum_{\mathbf{K}_m} \Delta(\mathbf{k}, \mathbf{R}) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} = E \sum_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} \quad (73)$$

$$-\sum_{\mathbf{K}_m} H_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} + \sum_{\mathbf{K}_m} \Delta^*(\mathbf{k}, \mathbf{R}) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} = E \sum_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m}. \quad (74)$$

Como hemos supuesto que el potencial es periódico $\Delta(\mathbf{k}, \mathbf{R} + \mathbf{R}_n) = \Delta(\mathbf{k}, \mathbf{R})$, se puede realizar una expansión en series de Fourier en la coordenada R , ver anexo A,

$$\Delta(\mathbf{k}, \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{R}} \Delta_{\mathbf{K}}(\mathbf{k}) \quad (75)$$

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{m \neq 0} e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} V_{\mathbf{K}}. \quad (76)$$

La aproximación usual es considerar que evaluar el potencial en $\Delta(\mathbf{k}, \mathbf{R})$ es aproximadamente el mismo que evaluarlo en $\Delta(\mathbf{k}, \mathbf{r})$, esto es válido cuando $(k_f \xi_0 \ll 1)$ [23] siendo ξ_0 la longitud de coherencia del superconductor. Con esta aproximación obtenemos

$$\Delta(\mathbf{k}, \mathbf{R}) \simeq \Delta(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} \Delta_{\mathbf{K}}(\mathbf{k}), \quad (77)$$

que al reemplazar en las ecuaciones de movimiento (73),(74) tenemos

$$\sum_{\mathbf{K}_m} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} + \sum_l e^{i(\mathbf{K}_m+\mathbf{K}_l) \cdot \mathbf{r}} V_l \right) u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} + \sum_{\mathbf{K}_m, \mathbf{K}_l} \Delta_l(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{K}_m+\mathbf{K}_l) \cdot \mathbf{r}} v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} = E \sum_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} \quad (78)$$

$$- \sum_{\mathbf{K}_m} \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} + \sum_l e^{i(\mathbf{K}_m+\mathbf{K}_l) \cdot \mathbf{r}} V_l \right) v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} + \sum_{\mathbf{K}_m, \mathbf{K}_l} \Delta_l^*(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{K}_m-\mathbf{K}_l) \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} = E \sum_{\mathbf{K}_m} e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m}, \quad (79)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m}$ es la energía de la partícula libre dada por

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m} = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_m)^2 - E_F. \quad (80)$$

Multiplicando por $e^{-i\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{r}}$ e integrando en el volumen de celda primitiva V tenemos

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n} + \sum_m V_{\mathbf{K}_n-\mathbf{K}_m} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} + \sum_{\mathbf{K}_m} \Delta_{\mathbf{K}_n-\mathbf{K}_m}(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} = E u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n} \quad (81)$$

$$-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n} - \sum_m V_{\mathbf{K}_n-\mathbf{K}_m} v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} + \sum_{\mathbf{K}_m} \Delta_{\mathbf{K}_m-\mathbf{K}_n}^*(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_m} = E v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n}. \quad (82)$$

Estas ecuaciones son las más generales que podemos tener, es un sistema de infinitas ecuaciones para cada valor de $u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n}$ y $v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n}$. En esta aproximación pensaremos que no todos los valores son igualmente importantes y despreciaremos los que son muy pequeños respecto al más grande, en este caso procederemos a encontrar las soluciones del sistema sin perturbar dadas por

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} - E(\mathbf{k}) & \Delta_0(\mathbf{k}) \\ \Delta_0^*(\mathbf{k}) & -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} - E(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n} \\ v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n} \end{pmatrix} = (0). \quad (83)$$

De estas ecuaciones obtenemos que las energías del sistema sin perturbar son $E^2(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_0(\mathbf{k})|^2$. A primer orden de perturbaciones obtenemos el sistema para los coeficientes $u_{\mathbf{k},\mathbf{k}_n}$ y $v_{\mathbf{k},\mathbf{k}_n}$ como

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} - E(\mathbf{k}) & \Delta_0(\mathbf{k}) \\ \Delta_0^*(\mathbf{k}) & -\varepsilon_{\mathbf{k}} - E(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k},0} \\ v_{\mathbf{k},0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -V_{\mathbf{K}_n} u_{\mathbf{k},0} - \Delta_{\mathbf{K}_n}(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k},0} \\ V_{\mathbf{K}_n} v_{\mathbf{k},0} - \Delta_{\mathbf{K}_n}(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k},0} \end{pmatrix}, \quad (84)$$

El determinante de este sistema de ecuaciones es dado por

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} - E(\mathbf{k}) & \Delta_0(\mathbf{k}) \\ \Delta_0^*(\mathbf{k}) & -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} - E(\mathbf{k}) \end{vmatrix} = E^2(\mathbf{k}) - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}^2 + |\Delta_0(\mathbf{k})|^2 = \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}^2, \quad (85)$$

y por lo tanto a primer orden obtenemos que las amplitudes perturbadas son de la forma

$$\begin{aligned} v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n}, u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n} &\propto \frac{1}{\left(\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}^2\right)} \\ &= \frac{1}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n})(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n})}. \end{aligned} \quad (86)$$

Vemos que esta aproximación no es válida cuando $(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}) = 0$ ó $\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} = 0$.

La primera condición nos lleva a

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} = \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}^2 - K_F^2) - \frac{\hbar^2}{2m}((\mathbf{k} + \mathbf{K}_n)^2 - K_F^2) = 0 \quad (87)$$

la cual se puede escribir como

$$\mathbf{K}_n \cdot (\mathbf{K}_n/2 + \mathbf{k}) = 0, \quad (88)$$

lo que corresponde a un plano ubicado en $\mathbf{K}_n/2$ y vector normal \mathbf{K}_n conocido como plano de Bragg como vimos en la ecuación (26).

En las soluciones de nuestro sistema tenemos dos tipos de parábolas, la condición de Bragg se obtiene cuando hay cruce entre las parábolas $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$ y $-\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$. Las parábolas con el signo + las llamaremos electrónicas en concordancia con la solución en el modelo de electrones cuasi-libres. Con ésto podemos pensar que la condición se refiere al punto de encuentro de dos de estas parábolas. Sin embargo en nuestro sistema no solo tenemos este tipo de parábolas correspondientes a las soluciones para u_{n,K_n} , tenemos parábolas invertidas con el signo menos para las soluciones con v_{n,K_n} con lo cual tenemos planos de Andreev para las parábolas que cumplan $(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}) = 0$, la diferencia radica cuando estas parábolas están por encima o por debajo del nivel de Fermi. Las brechas de los planos de Bragg para electrones y huecos se ubican en los mismos valores del vector de onda, pero sólo una de estas se encuentra por encima de la energía de Fermi para cada plano ver figura 6(a), (b).

La segunda condición donde la ecuación (86) no es válida, se puede escribir como

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n} = \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}^2 - K_F^2) + \frac{\hbar^2}{2m}((\mathbf{k} + \mathbf{K}_n)^2 - K_F^2) = 0 \quad (89)$$

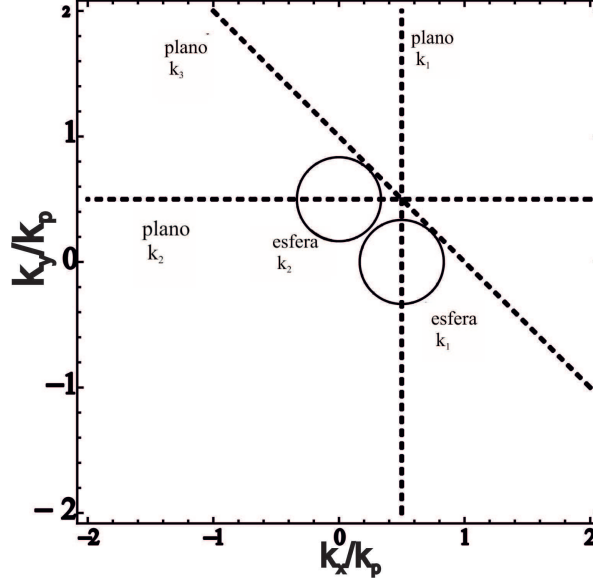


Figura 5: Planos de Bragg y esferas de Andreev para los siguientes vectores de la red recíproca de una red cuadrada $K_{1,0,0} = k_1 = (kp, 0, 0)$, $K_{0,1,0} = k_2 = (0, kp, 0)$ y $K_{1,1,0} = k_3 = (kp, kp, 0)$, los planos de Bragg y esferas de Andreev en el plano $k_x - k_y$. los valores de cada eje están normalizados para sobre $kp = 2\pi/a$ siendo a la longitud horizontal de la red cuadrada, y $k_f = kp/2 - 0,004kp$. Para k_3 no tenemos una esfera de Andreev asociada.

que reorganizando se obtiene

$$\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{K}_n}{2}\right)^2 = K_F^2 - \frac{\mathbf{K}_n^2}{4},$$

la cual representa una esfera de radio $\sqrt{K_F^2 - \frac{\mathbf{K}_n^2}{4}}$ y centrado en $\frac{\mathbf{K}_n}{2}$. Que el radio sea positivo depende del valor de K_F . La existencia de esta esfera, que llamamos esfera de Andreev [12], la obtenemos cuando $K_F > \frac{|\mathbf{K}_n|}{2}$. Esto significa que se tendrán tantas esferas como sean permitido por los vectores de la red recíproca, por ejemplo una red bidimensional rectangular pueden poseer cuatro esferas para los cuatro vectores más pequeños de la red recíproca, o inclusive una esfera para los siguientes cuatro vectores de la red recíproca.

La segunda condición que corresponde a $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$, equivale al cruce de una parábola electrónica con una de huecos que se encuentra desplazada por un vector de la red recíproca \mathbf{K}_n .

En la figura 5 se ilustran para tres vectores de una red recíproca cuadrada los planos de Bragg y las esferas de Andreev correspondientes, en la cual solo para dos de ellos se obtiene una esfera de Andreev. Con estos tipos de figuras se realiza el análisis dependiendo del número de cruces que se obtengan.

En resumen para las distintas parábolas de las soluciones electrón-hueco tenemos varias formas de

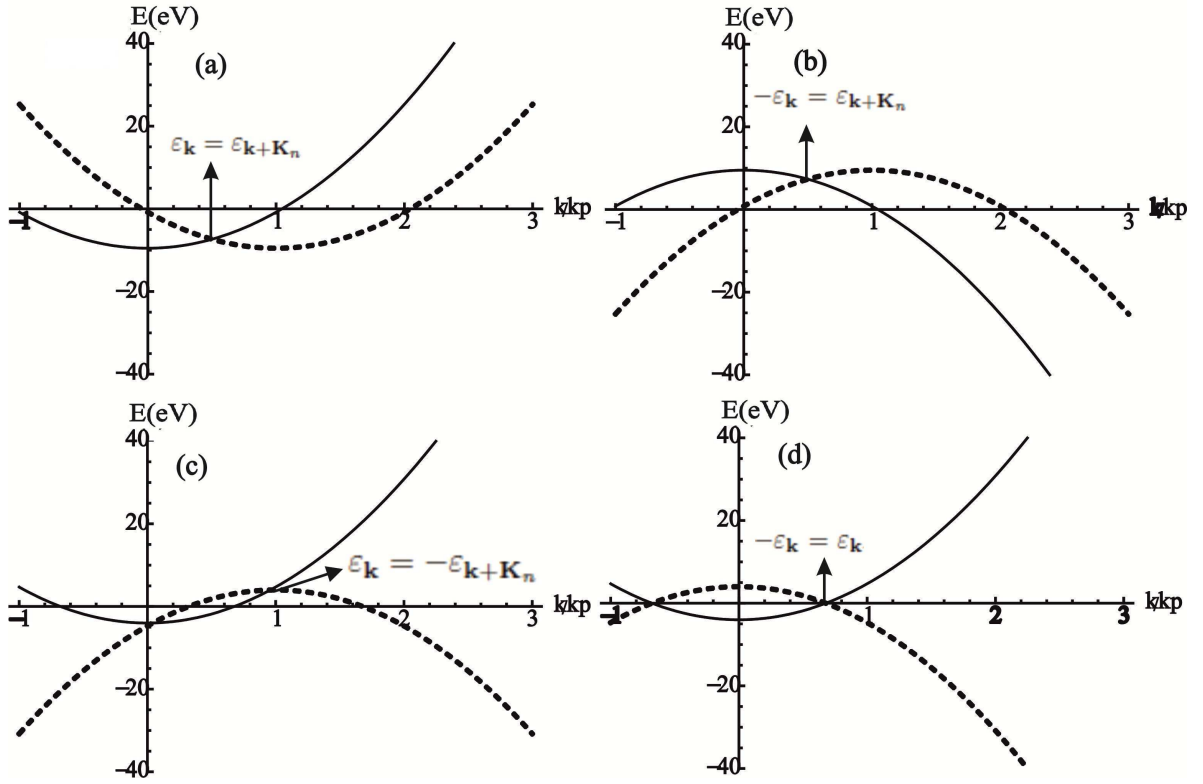


Figura 6: Diferentes parábolas de electrones y huecos para las soluciones cuasi-libres. (a) Cruce de dos parábolas electrónicas (a). (b) Cruce de dos parábolas tipo hueco. (c) Cruce de una parábola de electrones $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ con una de huecos en $-\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p}$. (d) cruce de una parábola de electrones con una de huecos para $\mathbf{k} = 0$

cruces que corresponden a los planos de Bragg, esferas de Andreev y brechas superconductoras sobre la superficie de Fermi. Primero tenemos los cortes dados por dos parábolas de electrones o huecos que generan los planos de Bragg (figura 6(a,b)), tenemos aparte de éstos los cortes que se generan por parábolas de un electrón y un hueco con distintos vectores de la red recíproca (esferas de Andreev) (figura 6(c)); finalmente tenemos el corte de una parábola electrón y hueco en $K_p = 0$ figura (6(d)). En estos cruces la aproximación a primer orden no es válida y debemos hacer una expansión a segundo orden y como vemos en cada cruce de estos aparece una brecha, que es ilustrada en la figura 7.

Ésto significa que debemos analizar una serie de casos, dependiendo como se ubican las distintas esferas de Andreev, planos de Bragg y superficies de Fermi.

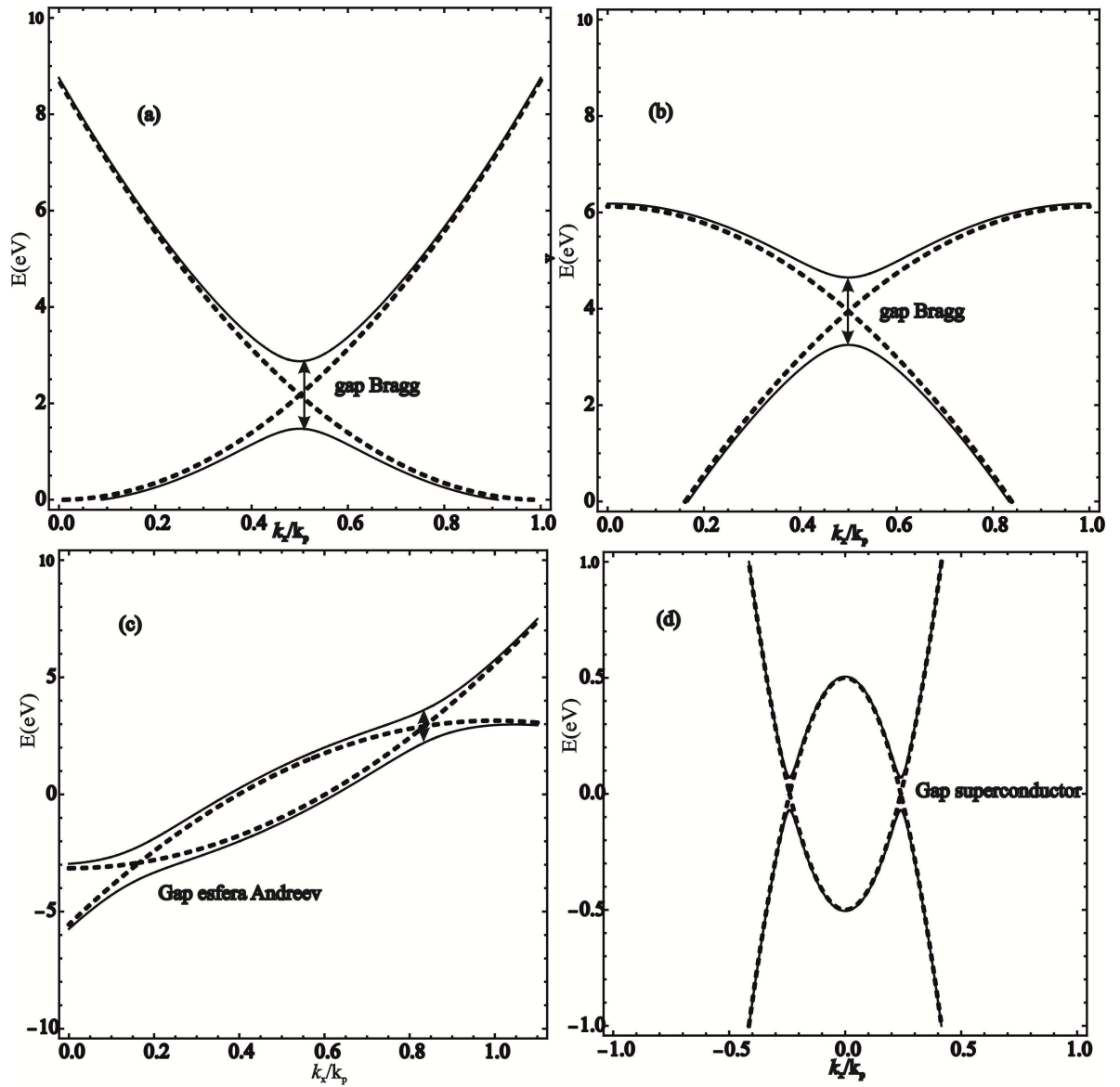


Figura 7: Se introducen la forma en que se generan las brechas para las soluciones cuasi-libres, comenzando por las electrónicas y tipo huecos (a,b), éstas se ven de igual manera para ambos. Las de superconductividad en la superficie de Fermi (c) se ve de igual manera que en los superconductores homogéneos (ver anexo B). Las producidas por la esfera de Andreev no poseen ese comportamiento de la brecha como las otras al verse inclinadas, es de notar que sin embargo la inclusión de un espectro mas detallado con los planos de Bragg cambia esta situación

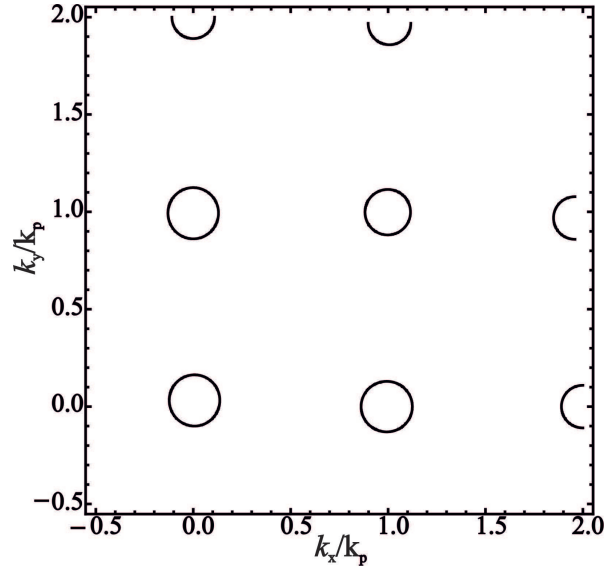


Figura 8: Tenemos la superficie de Fermi para una red bidimensional cuadrada con $K_f < \mathbf{k}_p/2$, esta es prácticamente una colección de círculos para el plano k_x, k_y , debido a que no hay puntos de cortes de la superficie de Fermi con los planos de Bragg

3.2. Primer caso brecha sobre la superficie de Fermi lejos de planos de Bragg y esferas de Andreev

La brecha sobre la superficie de Fermi y que no tenga corte ni con esferas de Andreev o planos de Bragg se comporta aproximadamente igual que la brecha homogénea, la razón es simple, las soluciones lejos de planos de Bragg y esferas de Andreev se comportan bastantes parecidos a las soluciones homogéneas. Sin embargo como observamos en el marco teórico la superficie de Fermi se deforma en un plano de Bragg. Por lo cual para el análisis completo deberemos continuar con un corte en los planos de Bragg. Es de considerar que en el caso de tener que $k_F \ll k_1/2$ siendo k_1 el vector menor de la red recíproca, la superficie de Fermi son casi esféricas centradas en cada punto de red ver figura 8.

3.3. Brecha en el caso de sólo un plano de Bragg o esfera de Andreev

Como mencionamos, las soluciones a primer orden (86) no son válidas cuando $|\varepsilon_{\mathbf{k}}| = |\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}|$. Para mejorar esta aproximación no podemos despreciar a primer orden los términos $u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n}$ y $v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_n}$. Estos dos casos se pueden escribir de manera conjunta siempre que no tengamos cruces de dos o más planos

de Bragg con esferas de Andreev. Para ello realizamos a primer orden la expansión de (81) y (82) en los cuales tendrán relevancia para un valor particular de n que llamaremos p , con lo cual la expansión la realizaremos para los términos que tengan K_n con $K_n = K_p$, el sistema de ecuaciones que se obtiene es el siguiente.

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} - E & V_{\mathbf{K}_p} & \Delta_{\mathbf{0}}(\mathbf{k}) & \Delta_{-\mathbf{K}_p}(\mathbf{k}) \\ V_{\mathbf{K}_p} & \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p} - E & \Delta_{\mathbf{K}_p}(\mathbf{k}) & \Delta_{\mathbf{0}}(\mathbf{k}) \\ \Delta_{\mathbf{0}}^*(\mathbf{k}) & \Delta_{\mathbf{K}_p}^*(\mathbf{k}) & -\varepsilon_{\mathbf{k}} - E & -V_{\mathbf{K}_p} \\ \Delta_{-\mathbf{K}_p}^*(\mathbf{k}) & \Delta_{\mathbf{0}}^*(\mathbf{k}) & -V_{\mathbf{K}_p} & -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k},\mathbf{0}} \\ u_{\mathbf{k},\mathbf{K}_p} \\ v_{\mathbf{k},\mathbf{0}} \\ v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_p} \end{pmatrix} = 0 \quad (90)$$

En general para el potencial de la red periódica obtenemos que

$$V_{-\mathbf{K}_p} = V_{\mathbf{K}_p} = V_{\mathbf{K}_p}^*,$$

expresión válida cuando el material es infinito y en un sistema de coordenadas. Para tener una solución no trivial el determinante de la matriz (90) debe ser cero, con lo cual obtenemos la siguiente ecuación para el espectro de energía

$$E^4 + A_2 E^2 + A_1 E + A_0 = 0 \quad (91)$$

donde los coeficientes A_0 , A_1 y A_2 son dados por

$$A_2 = \left(-\varepsilon_k^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p}^2 - |\Delta_{-\mathbf{K}_p}|^2 - |\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2 - 2|\Delta_0|^2 - 2V_{\mathbf{K}_p}^2 \right) \quad (92)$$

$$A_1 = \left(|\Delta_{-\mathbf{K}_p}|^2 - |\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2 \right) (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p} - \varepsilon_k) \quad (93)$$

$$\begin{aligned} A_0 = & V_{\mathbf{K}_p}^4 + \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p}^2 + |\Delta_0|^4 + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{-\mathbf{K}_p}^* \Delta_{\mathbf{K}_p}) V_{\mathbf{K}_p}^2 - 2 \operatorname{Re}((\Delta_0^*)^2 \Delta_{\mathbf{K}_p} \Delta_{-\mathbf{K}_p}) \\ & + |\Delta_0|^2 (\varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p}^2 + 2V_{\mathbf{K}_p}^2) + \varepsilon_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p} \left(|\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2 + |\Delta_{-\mathbf{K}_p}|^2 - 2V_{\mathbf{K}_p}^2 \right) \\ & - 2 \operatorname{Re}(\Delta_0 (\Delta_{-\mathbf{K}_p}^* + \Delta_{\mathbf{K}_p}^*)) \varepsilon_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{K}_p} - 2 \operatorname{Re}(\Delta_0 (\Delta_{-\mathbf{K}_p}^* + \Delta_{\mathbf{K}_p}^*)) V_{\mathbf{K}_p} \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p} \\ & + |\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2 |\Delta_{-\mathbf{K}_p}|^2, \end{aligned} \quad (94)$$

Recordando que $\Delta_{\mathbf{K}_p}$ está definido por la expansión de Fourier de $\Delta(\mathbf{r})$, obtenemos que los coeficientes están dados por

$$\Delta_{\mathbf{K}_p}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{K}_p \cdot \mathbf{r}} \Delta(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \quad (95)$$

La ecuación (91) no posee solución analítica, sin embargo es posible resolverla numéricamente. Todas las figuras de espectro de energía del presente trabajo son realizadas usando un algoritmo numérico que concuerda con los casos especiales presentados a continuación. Este método es ilustrado en el anexo C.

Para obtener una solución analítica supondremos que $|\Delta_{-\mathbf{K}_p}|^2 = |\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2$. Condición que en particular se consigue para los superconductores con centro de simetría de inversión donde $\Delta(\mathbf{k}, -\mathbf{r}) = \Delta(\mathbf{k}, \mathbf{r})$, con lo cual la energía está dada por

$$E^2 = \varepsilon_+^2(\mathbf{k}) + \varepsilon_-^2(\mathbf{k}) + V_{\mathbf{K}_p}^2 + |\Delta_0(\mathbf{k})|^2 + |\Delta_{\mathbf{K}_p}(\mathbf{k})|^2 \quad (96)$$

$$\begin{aligned} & \pm \{4\varepsilon_+^2(\mathbf{k}) (V_{\mathbf{K}_p}^2 + \varepsilon_-^2(\mathbf{k})) + 2|\Delta_{\mathbf{K}_p}(\mathbf{k})|^2 (2\varepsilon_-^2(\mathbf{k}) + |\Delta_0(\mathbf{k})|^2) \\ & + 8\varepsilon_+(\mathbf{k}) V_{\mathbf{K}_p} \operatorname{Re}(\Delta_0(\mathbf{k}) \Delta_{\mathbf{K}_p}^*(\mathbf{k})) + 2\operatorname{Re}(\Delta_0^2(\mathbf{k}) \Delta_{\mathbf{K}_p}^{*2}(\mathbf{k}))\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (97)$$

con

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_p} \pm \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2} \quad (98)$$

Pasaremos a analizar dos casos donde es válida la expresión anterior para el espectro de energía. El primero en las cercanías de un plano de Bragg y el segundo cerca de una esfera de Andreev. Para el primer caso sí suponemos que el vector \mathbf{k} está en la misma dirección de la red recíproca y pertenece a un plano de Bragg, con lo cual al usar que en los planos ($\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$), obtenemos

$$\varepsilon_- = 0 \quad (99)$$

$$\varepsilon_+ = \varepsilon(-\mathbf{K}_p/2) \quad (100)$$

Con ésto se obtiene que la energía es

$$\begin{aligned} E^2 &= \varepsilon^2(-\mathbf{K}_p/2) + V_{\mathbf{K}_p}^2 + |\Delta_0(-\mathbf{K}_p/2)|^2 + |\Delta_{-\mathbf{K}_p/2}(-\mathbf{K}_p)|^2 \\ & \pm \{4\varepsilon^2(-\mathbf{K}_p) V_{-\mathbf{K}_p}^2 + 2|\Delta_{-\mathbf{K}_p}(-\mathbf{K}_p/2)|^2 |\Delta_0(-\mathbf{K}_p/2)|^2 \\ & + 8\varepsilon(\mathbf{k}) V_{-\mathbf{K}_p} \operatorname{Re}(\Delta_0(\mathbf{K}_p/2) \Delta_{-\mathbf{K}_p}^*(-\mathbf{K}_p/2)) + 2\operatorname{Re}(\Delta_0^2(-\mathbf{K}_p/2) \Delta_{-\mathbf{K}_p}^{*2}(-\mathbf{K}_p/2))\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (101)$$

para entender un poco mas la anterior expresión usamos un potencial de pares isotrópico y real obteniendo

$$E^2 = \varepsilon^2 (-\mathbf{K}_p/2) + V_{\mathbf{K}_p}^2 + |\Delta_0|^2 + |\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2 \pm 2 |\varepsilon (-\mathbf{K}_p/2) V_{\mathbf{K}_p} + \Delta_{\mathbf{K}_p} \Delta_0|. \quad (102)$$

Nuestra última expresión corresponde a dos bandas de energía, con una brecha dada por

$$\Delta E = \sqrt{\varepsilon^2 (-\mathbf{K}_p/2) + V_{\mathbf{K}_p}^2 + |\Delta_0|^2 + |\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2 + 2 |\varepsilon (\mathbf{K}_p/2) V_{\mathbf{K}_p} + \Delta_{-\mathbf{K}_p} \Delta_0|} - \sqrt{\varepsilon^2 (-\mathbf{K}_p/2) + V_{\mathbf{K}_p}^2 + |\Delta_0|^2 + |\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2 - 2 |\varepsilon (-\mathbf{K}_p/2) V_{\mathbf{K}_p} + \Delta_{\mathbf{K}_p} \Delta_0|} \quad (103)$$

dado que estamos alejados de la superficie de Fermi tenemos que $-\varepsilon (\mathbf{K}_p/2) \gg V_{\mathbf{K}_p}, \Delta_{\mathbf{K}_p}, \Delta_0$ y por lo tanto $\varepsilon (-\mathbf{K}_p/2) V_{\mathbf{K}_p} \gg \Delta_{\mathbf{K}_p}, \Delta_0$ puesto que los valores de energía de $\varepsilon (-\mathbf{K}_p/2)$ se incrementan a medida que aumenta $|\mathbf{K}_p|$ mientras que los otros términos disminuyen con $|\mathbf{K}_p|$ o son constantes, con lo cual $2 |\varepsilon (-\mathbf{K}_p/2) V_{\mathbf{K}_p} + \Delta_{\mathbf{K}_p} \Delta_0| \approx 2\varepsilon (\mathbf{K}_p/2) V_{\mathbf{K}_p}$, donde escogemos la condición de que $\varepsilon (\mathbf{K}_p/2) > 0$

$$\Delta E = \sqrt{(\varepsilon (-\mathbf{K}_p/2) + V_{\mathbf{K}_p})^2 + |\Delta_0|^2 + |\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2} - \sqrt{(-\varepsilon (\mathbf{K}_p/2) - V_{\mathbf{K}_p})^2 + |\Delta_0|^2 + |\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2} \quad (104)$$

Por la misma razón anterior es $(\varepsilon (-\mathbf{K}_p/2) + V_{\mathbf{K}_p})^2 \gg |\Delta_0|^2, |\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2$ y tenemos que la brecha está dada por

$$\Delta E = |\varepsilon (-\mathbf{K}_p/2) + V_{\mathbf{K}_p}| - |\varepsilon (-\mathbf{K}_p/2) - V_{\mathbf{K}_p}| = 2V_{\mathbf{K}_p} \quad (105)$$

En otras palabras, para los planos de Bragg tenemos que la brecha se comporta como $2V_{\mathbf{K}_p}$ al igual que en los metales, siempre que no esté cerca una esfera de Andreev o una superficie de Fermi. Notaremos las brechas de Bragg usando como subíndice el coeficiente del plano, por ejemplo, el primer plano de Bragg sera $V_1 = V_{\mathbf{K}_1}$. Esta condición es independiente si el vector esta o no en la misma dirección del vector de la red reciproca. Esta condición permite decir que las soluciones en los planos de Bragg serán aproximadamente iguales a las de los metales normales sin superconductividad siempre que no tenga esferas de Andreev y esté lejos de la superficie de Fermi. Resultado que puede verse en la figura 9 donde tenemos el resultado del espectro con la solución dada por la ecuación(91) y el del metal normal superpuestos para el primer vector de la red reciproca.

El segundo caso que se puede estudiar con la ecuación (91) es cuando los estados están sobre una esfera de Andreev y lejos de la superficie de Fermi y planos de Bragg. Para realizar el análisis volveremos a usar que los vectores \mathbf{k} esten en la misma dirección \mathbf{K}_p , aunque el resultado general es invariante de la dirección particular que se tome. Cuando \mathbf{k} pertenece a la esfera de Andreev, obtenemos que

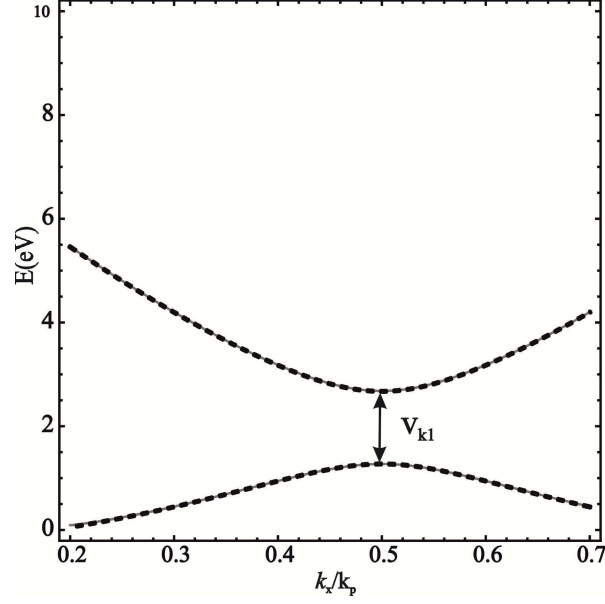


Figura 9: En el espectro de energía se muestra cerca al plano de Bragg las soluciones dadas por la ecuación 91 (línea continua) para los valores de $V_{k1} = 0,7eV$, $K_F = k_p/2 - 0,04k_p$. En este caso se ha calculado el resultado para un metal (línea a rayas), es de notar que el espectro se parece al de un metal normal aunque solo se ha escogido el primer plano de Bragg k_1 .

$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_n}$ condición que conduce a

$$\varepsilon_- = \varepsilon(k_a) \quad (106)$$

$$\varepsilon_+ = 0 \quad (107)$$

con

$$k_a = -\frac{|\mathbf{K}_p|}{2} \pm \sqrt{K_F^2 - (|\mathbf{K}_p|/4)^2} \quad (108)$$

que al reemplazar en (101) para un potencial de pares isotrópico y real obtenemos

$$E^2 = \varepsilon^2(k_a) + V_{\mathbf{K}_p}^2 + \Delta_0^2 + \Delta_{\mathbf{K}_p}^2 \pm 2\{\Delta_{\mathbf{K}_p}^2 \varepsilon_-^2(k_a) + \Delta_0^2 \Delta_{\mathbf{K}_p}^2\}^{1/2}, \quad (109)$$

Nuestra última ecuación corresponde a dos bandas en el espectro de energía, con una brecha dada por

$$\Delta E = \sqrt{\varepsilon^2(k_a) + V_{\mathbf{K}_p}^2 + \Delta_0^2 + \Delta_{\mathbf{K}_p}^2 + 2\{\Delta_{\mathbf{K}_p}^2 \varepsilon^2(k_a) + \Delta_0^2 \Delta_{\mathbf{K}_p}^2\}^{1/2}} - \sqrt{\varepsilon^2(k_a) + V_{\mathbf{K}_p}^2 + \Delta^2 + \Delta_{\mathbf{K}_p}^2 - 2\{\Delta_{\mathbf{K}_p}^2 \varepsilon^2(k_a) + \Delta_0^2 \Delta_{\mathbf{K}_p}^2\}^{1/2}} \quad (110)$$

Para el caso que estamos analizando tenemos que $\varepsilon(k_a) \gg V_{\mathbf{K}_p}, \Delta_{\mathbf{K}_p}, \Delta_0$ y por lo tanto $\varepsilon(\mathbf{K}_p/2) \Delta_{\mathbf{K}_p}^2 \gg \Delta_{\mathbf{K}_p} \Delta_0$ puesto que los valores de energía $\varepsilon(k_a)$ son mayores que los demás potenciales

$$\Delta E = \sqrt{\varepsilon^2(k_a) + V_{\mathbf{K}_p}^2 + \Delta_0^2 + \Delta_{\mathbf{K}_p}^2 + 2\Delta_{\mathbf{K}_p} \varepsilon(k_a)} - \sqrt{\varepsilon^2(k_a) + V_{\mathbf{K}_p}^2 + \Delta_0^2 + \Delta_{\mathbf{K}_p}^2 - 2\Delta_{\mathbf{K}_p} \varepsilon(k_a)} \quad (111)$$

Por la misma razón anterior tenemos $(\varepsilon(\mathbf{K}_p/2) \pm \Delta_{\mathbf{K}_p})^2 \gg |\Delta_0|^2, |\Delta_{\mathbf{K}_p}|^2$

$$\Delta E = |\varepsilon(k_a) + \Delta_{\mathbf{K}_p}| - |\varepsilon(k_a) - \Delta_{\mathbf{K}_p}| = 2\Delta_{\mathbf{K}_p} \quad (112)$$

En otras palabras en los estados sobre las esferas de Andreev obtenemos que la brecha en energía se comporta como $2\Delta_{\mathbf{K}_p}$. Entre las diferencias entre esta brecha y la de Bragg, es que se debe tener un radio positivo para la esfera y por lo tanto sólo para unos \mathbf{K}_p existirán las esferas de Andreev. Se definirán las esferas de acuerdo al coeficiente más importante en la expansión en serie de Fourier del potencial de pares, por ejemplo, para la primera esfera de andreev de existir se notara Δ_1 .

Con el valor de $\varepsilon(k_a)$ definido en la ecuación (108) que determina en donde se ubica la brecha superconductor $\Delta_{\mathbf{K}_p}$ de la esfera se obtiene que esta brecha se encuentra mas cerca del nivel de Fermi a medida que \mathbf{K}_n aumenta, siempre y cuando la esfera de Andreev exista. Como se observa en la figura 10 (a) la parábola de hueco mas alejada de la primera parábola electrónica cruza la electrónica a una energía menor que la mas cercana. En las brechas se verá que la esfera de Andreev Δ_2 está por debajo de la esfera de Andreev Δ_1 figura 10 (b). En la figura de la superficie de Fermi figura 10 (c), la cual muestra que las esferas de Andreev y los planos de Bragg, la segunda esfera tiene un radio menor comparado con la de primer orden y esta mas cerca de la superficie de Fermi. Esto es importante dado que los efectos de la superconductividad son más relevantes cuando estamos cerca al nivel de Fermi.

3.4. Cuando la esfera de Andreev corta un plano de Bragg

En los materiales se pueden tener cruces de varios planos de Bragg, con varias esferas de Andreev y la superficie de Fermi. El caso donde el plano de Bragg y la superficie de Fermi se cruzan se menciona

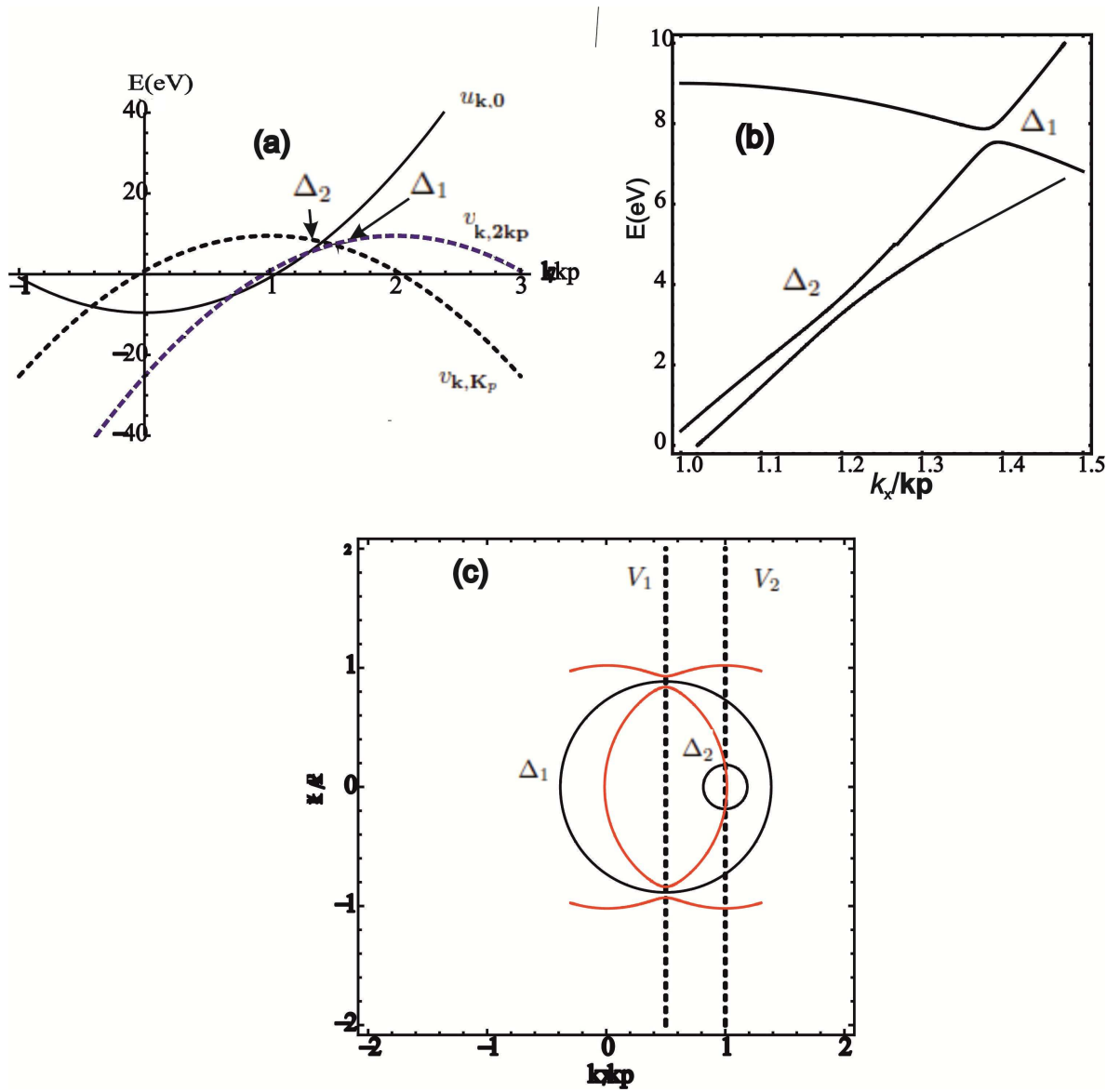


Figura 10: (a) Corte de la parábola electrónica con la de huecos para la esfera de primer orden Δ_1 y segundo orden Δ_2 . (b) Las brechas se muestran de forma cualitativa usando solo los cruces y se observa que la de segundo orden esta mas cerca de la superficie de Fermi. (c) figura correspondiente a la esfera de primer orden Δ_1 y segundo orden Δ_2 , a los planos de primer orden V_1 y segundo orden V_2 , junto con la superficie de Fermi (línea roja).

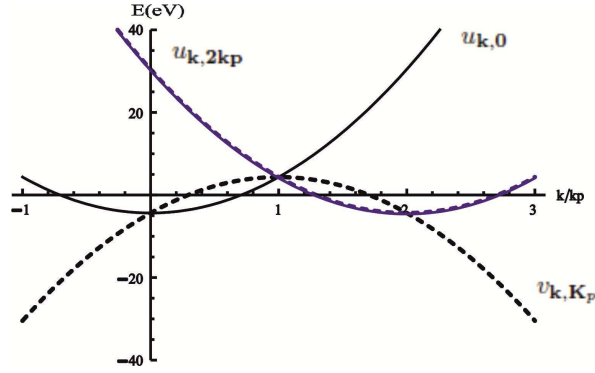


Figura 11: En la figura se gráficán las tres parábolas, dos electrónicas para el plano de Bragg llamadas $u_{\mathbf{k},0}$ y $u_{\mathbf{k},2\mathbf{k}_p}$, y una de huecos $v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_p}$. Las tres parábolas se cruzan en un punto con lo cual la aproximación para encontrar el espectro de energía deben involucrar todas éstas y los términos de Fourier de los potenciales.

en el anexo C. Analizaremos el caso donde ocurre un sencillo cruce de un plano de Bragg que no sea de orden uno, con una esfera de Andreev.

Esta condición de cruce de plano de Bragg con esfera de Andreev se puede obtener cuando $\frac{|k_1|}{2} < K_F < |k_1|$ en una red en donde solo tenemos este efecto en una dirección. En este caso tenemos que el segundo plano de Bragg toca la esfera de Andreev. Como tenemos el cruce de un plano de Bragg de orden 2 con una esfera de Andreev de orden 1, la solución anterior no es válida. Para encontrar una solución vamos a tener en cuenta sólo el efecto del potencial V_2 y Δ_1 simultáneamente, despreciando el efecto de otros potenciales como Δ_0 , V_2 , etc. dado que los efectos de estos no aparecen cerca de $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{p_2}$

Con estas condiciones podemos escribir para el punto donde se encuentre el segundo plano de Bragg con la esfera de Andreev la siguiente ecuación para encontrar el espectro de energía cerca de la región de cruce

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{k}} - E & V_{-2\mathbf{k}_p} & \Delta_{-\mathbf{k}_p}(\mathbf{k}) \\ V_{2\mathbf{k}_p} & \varepsilon_{\mathbf{k}+2\mathbf{k}_p} - E & \Delta_{\mathbf{k}_p}(\mathbf{k}) \\ \Delta_{-\mathbf{k}_p}^*(\mathbf{k}) & \Delta_{\mathbf{k}_p}^*(\mathbf{k}) & -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_p} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k},0} \\ u_{\mathbf{k},2\mathbf{k}_p} \\ v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_p} \end{pmatrix} = 0, \quad (113)$$

en la matriz se introducen los correspondientes al segundo plano de Bragg producido por el cruce de las dos parábolas electrónicas $u_{\mathbf{k},0}$ y $u_{\mathbf{k},2\mathbf{k}_p}$, y la esfera de Andreev por la parábola de hueco $v_{\mathbf{k},\mathbf{K}_p}$, esto puede apreciarse en la figura 11.

Del determinante de la matriz que aparece en (113) igualado a cero obtenemos el espectro, obteniendo

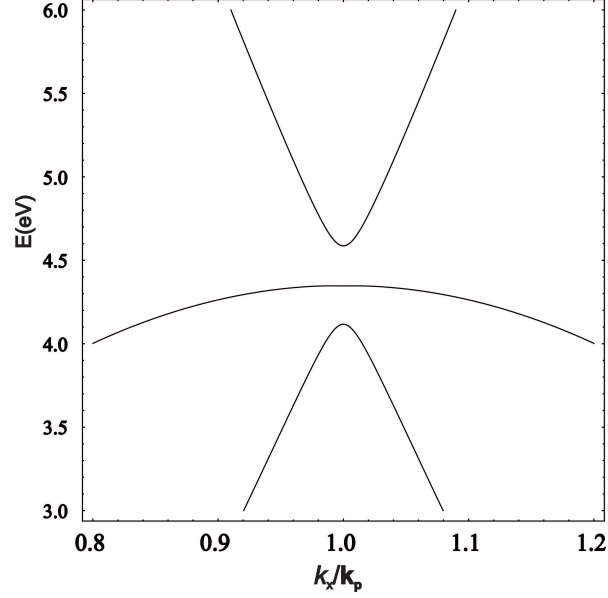


Figura 12: Espectro superconductor para el segundo plano de Bragg cuando la esfera de Andreev corta ése plano, se aprecian tres líneas las cuales corresponderán a una reflexión de Bragg y una reflexión de Andreev.

$$\begin{aligned}
& (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_p} + \varepsilon_{\mathbf{k}+2\mathbf{k}_p}) E^2 - E^3 + \left(V_{2kp}^2 + \varepsilon_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_p} - \varepsilon_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}+2\mathbf{k}_p} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_p}\varepsilon_{\mathbf{k}+2\mathbf{k}_p} + |\Delta_{-\mathbf{k}_p}(\mathbf{k})|^2 + |\Delta_{\mathbf{k}_p}(\mathbf{k})|^2 \right) E \\
& + \left(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_p} V_{2kp}^2 + 2V_{2kp} \operatorname{Re}(\Delta_{\mathbf{k}_p}(\mathbf{k})\Delta_{-\mathbf{k}_p}(\mathbf{k})) - \varepsilon_{\mathbf{k}}\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{k}_p}\varepsilon_{\mathbf{k}+2\mathbf{k}_p} - \varepsilon_{\mathbf{k}+2\mathbf{k}_p} |\Delta_{-\mathbf{k}_p}(\mathbf{k})|^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}} |\Delta_{\mathbf{k}_p}(\mathbf{k})|^2 \right) = 0
\end{aligned} \tag{114}$$

En este caso usando la forma mencionada en el anexo D obtenemos los espectros figura 12. El espectro muestra una deformación del plano de Bragg. Se obtiene una tercera línea, cuando se compara con un espectro con una sola brecha de Bragg figura 13. Esta segunda línea es producida por la esfera de Andreev y su efecto será alterar la brecha de Bragg. Cuando la esfera de Andreev esté antes del plano se obtiene un espectro como en la figura 14. En ésta se obtiene que la brecha de Bragg es igual que en los metales, y corresponde a la corrección al espectro realizado por [12].

3.5. Dibujar un espectro de energía

Para dibujar un espectro de energía se escogen los distintos planos de Bragg y esferas de Andreev presentes para el material, Para cada zona se encuentran los valores importantes y se grafica para la primera zona de Brillouin los valores del espectro. Por ejemplo escogemos una red donde el espectro superconductor sea relevante en una dimensión, para esto escogemos un $\mathbf{K}_1, 0, 0 = (kp, 0, 0)$ con $kp = 2\pi/a$ siendo a la separación entre iones de una red cuadrada. El K_F nos determinará las distintas

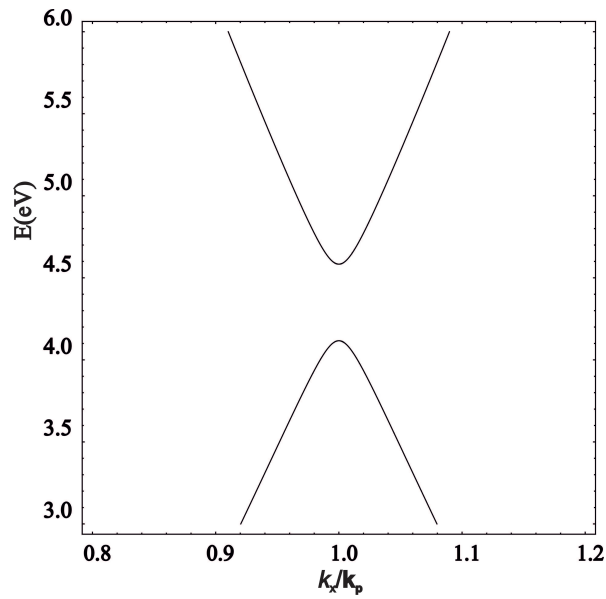


Figura 13: El caso donde sólo esté el plano de Bragg se obtiene una sola brecha. Esta brecha corresponde a la estimada para el segundo plano de Bragg. Existe una diferencia con respecto a la de solo el plano de Bragg, esto es debido a que al estar cerca a una esfera de Andreev la brecha de Bragg no es la misma que la del metal normal.

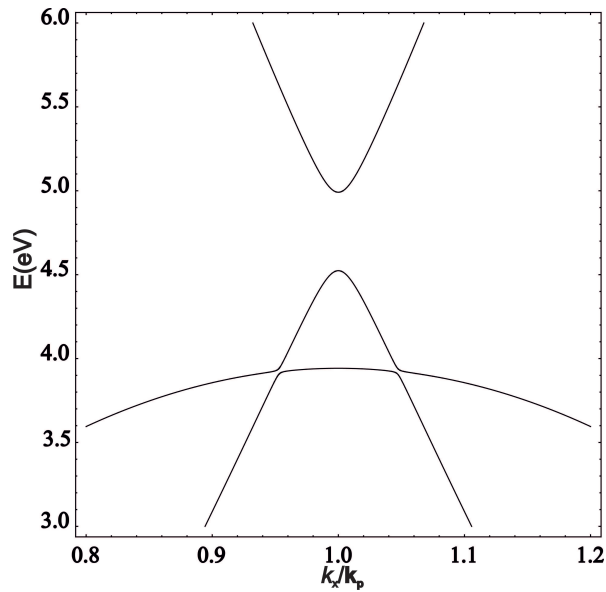


Figura 14: Espectro de energía para el segundo plano de Bragg, cuando la esfera de Andreev se encuentra antes del plano de Bragg. Este espectro será la continuación del caso tratado en [12]. Es de notar que en la referencia solo se trata el caso para el primer plano de Bragg y la primera esfera de Andreev pero es debido a la proximidad del segundo plano con el primero que se debe tener en cuenta éste para las gráficas del espectro.

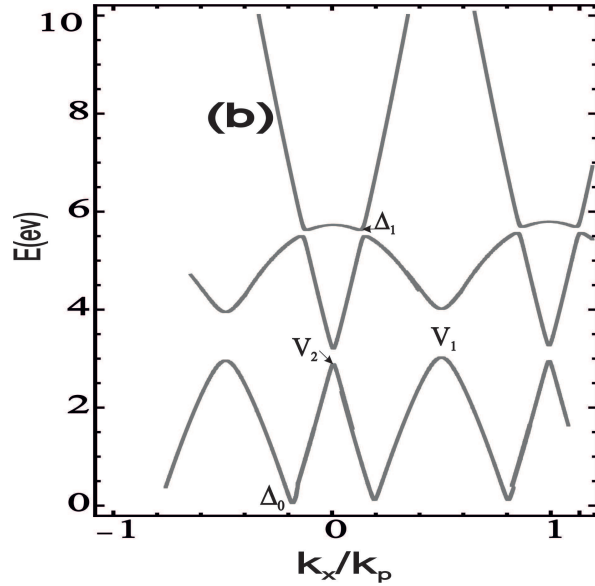


Figura 15: Espectro de energía para un superconductor para el cual $\mathbf{K}_1, 0, 0 = (kp, 0, 0)$ y $K_F = kp\sqrt{2}/2$. Se realiza la gráfica para las bandas de energía, notando que el plano de Bragg V_1 corresponde a huecos y se encuentra en un nivel de energía similar al del segundo plano de Bragg correspondiente a electrones. La esfera de Andreev se encuentra por encima de el segundo plano de Bragg con lo cual se obtiene un rango de energía prohibida y una nueva banda en el espectro.

formas de la superficie de Fermi, y las esferas de Andreev. Los diferentes casos mencionados están dados por los distintos valores que K_F pueda tomar, por ejemplo para que la esfera de Andreev cruce exactamente un plano de Bragg, obtenemos que $K_F = kp\sqrt{2}/2$, con lo cual si nos movemos un poco por encima de este valor y graficamos con respecto a kp obtenemos un espectro como se muestra en la figura 15 para los valores en la dirección $\mathbf{K}_1, 0, 0$ y las dos primeras brechas de Bragg y la primera brecha de Andreev, es de notar que para la mayoría de los superconductores de alta temperatura ésta es la situación.

En este espectro primero notamos que la brecha que corresponde al primer plano de Bragg corresponde al de cruce de dos parábolas de huecos que están por encima del nivel de Fermi. La segunda brecha de Bragg efectivamente corresponde a una electrónica, aunque se aprecia que los valores y ubicación están casi al mismo nivel que la primera. Los lugares que corresponden a una brecha de Andreev están por encima de los valores de Brechas de Bragg.

La inclusión de anisotropía en estos casos no se realiza de forma normal, debido a que el potencial en una dirección predeterminada debe tener la misma brecha. Si escogemos un potencial de pares que no sea idéntico sobre la superficie de Fermi del material, tendremos casos que para una dirección tengamos dos valores de brechas distintas. Un gap isotropico extendido como en “tight binding” sera entonces

una función del vector de onda tal que sobre la superficie de Fermi tenga el mismo valor, resultado no fácil de lograr para estos modelos excepto para el valor constante.

4. Modelo “Tight Binding” para superconductores

En este capítulo vamos a abordar otra metodología para resolver problemas en los que el Hamiltoniano es periódico llamada “Tight Binding” aplicada a superconductividad. El modelo “Tight Binding” el cual fue explicado en el marco teórico, lo aplicamos como comparación ya que se pueden realizar aproximaciones que son opuestas a la de electrones cuasi-libres. Con este modelo podemos hacer una comparación y un acercamiento a sistemas más complejos como los superconductores de alta temperatura (H-TC). En este modelo introducimos funciones de onda localizadas en los iones para los electrones y con éstas se realizan acoplamientos entre diferentes sitios de la red, estos parámetros de acople se denomina usualmente “hopping”.

Los modelos que consideramos corresponden a primeros vecinos para los valores electrónicos. La información de las cuasi-partículas está codificado dentro de las relaciones de recurrencia y el Hamiltoniano con lo cual sin éste el proceso no tiene sentido. Un modelo “Tight Binding” para superconductividad solo puede ser completamente entendido cuando se introduce las relaciones de auto-consistencia anexo A. En estas relaciones se añade la información de como es posible la creación final de las cuasi-partículas.

En el Hamiltoniano la información corresponde a la creación o destrucción de un par de electrones en sitios de red, de esta manera un valor de delta entre dos sitios de la red periódica no indica los pseudo-momentos de los electrones. Al realizar la transformación a una base de Bloch obtenemos la información de los momentos y obtenemos que al igual de los cálculos anteriores un momento opuesto de los electrones. Realizaremos dos modelos para introducirnos en lo que podemos encontrar cuando trabajamos en estos sistemas, partiendo de una sistema unidimensional que no posee energía de Fermi pero la forma de los potenciales de pares es clara y nos llevan a ideas de que esperar para modelos complejos. Y un modelo bidimensional en donde podemos realizar un análisis sobre una superficie de Fermi y la influencia del potencial de pares a la anisotropía de la brecha superconductora.

Primero vamos a abordar el problema de una sistema unidimensional en donde se encontrará el espectro de energía de las cuasi-partículas, y consideraremos diferentes opciones para incluir el término de apareamiento entre electrones. Luego extenderemos este modelo a un problema bidimensional, el cual es más complejo pero que nos permite acercarnos a un sistema “más real”. Finalmente comparamos los resultados en el modelo TB con los obtenidos previamente en la aproximación de electrones cuasi-libres.

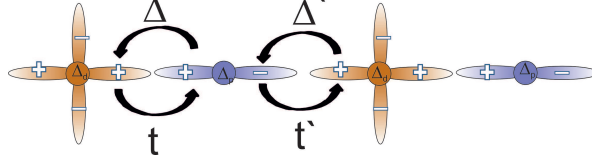


Figura 16: Red unidimensional para dos átomos que se acoplan con orbitales d y p . En el modelo usamos aproximación de primeros vecinos para los términos de acople t . Los Δ simbolizan el acople entre dos electrones.

4.1. Sistema unidimensional

De acuerdo al modelo Tight-Binding (TB) tenemos que decidir los “salto” que puede hacer el electrón, para el desarrollo de una sistema unidimensional. En nuestro caso pensaremos en una interacción a primeros vecinos de una sistema de dos motivos atómicos, y tomaremos como ejemplo átomos de cobre y oxígeno (CuO_2). Solamente consideraremos las bandas p de los átomos de oxígeno con las bandas d de los átomos de cobre, ver figura 16.

En este modelo tenemos que a primeros vecinos el Hamiltoniano BdG-TB es dado por

$$\hat{H} = \sum_i \left\{ \sum_{\sigma} \left(t_d c_{d,i,\sigma}^{\dagger} c_{d,i,\sigma} + t_p c_{p,i,\sigma}^{\dagger} c_{p,i,\sigma} + t c_{d,i,\sigma}^{\dagger} c_{p,i,\sigma} + t' c_{p,i,\sigma}^{\dagger} c_{d,i+1,\sigma} + h.c. \right) + \right. \quad (115)$$

$$\left. \Delta_d^* c_{d,i\downarrow} c_{d,i\uparrow} + \Delta_p^* c_{p,i\downarrow} c_{p,i\uparrow} + \Delta^* c_{p,i\downarrow} c_{d,i\uparrow} + \Delta^* c_{d,i\downarrow} c_{p,i\uparrow} + \Delta'^* c_{p,i\downarrow} c_{d,i+1\uparrow} + \Delta'^* c_{d,i+1\downarrow} c_{p,i\uparrow} + h.c. \right\}, \quad (116)$$

donde $t_d(t_p)$ es la energía para crear un electrón en el orbital $d(p)$ con respecto a la energía de Fermi. En el modelo no se tiene en cuenta el intercambio de espines de los electrones al moverse de un sitio a otro. Para la creación o destrucción de los pares de electrones se tiene dos posibilidades, crear los dos en el mismo sitio de red con espines opuestos, o en dos sitios contiguos. Para ello tenemos cuatro potenciales de pares diferentes, éstos tienen información de donde se crean o destruyen los dos electrones, si son en el mismo punto de red los llamamos Δ_p o Δ_d , según se crean ambos en el orbital p o d respectivamente. Y tenemos dos tipos más de potenciales de pares Δ cuando la creación de pares de electrones ocurre entre la parte positiva de un orbital p y un orbital d , y Δ' cuando la creación es entre la parte negativa de un orbital p y la parte positiva de un orbital p .

Para hallar el espectro de energía es necesario primero llevarlo a una base de Bloch, para ésto

definimos la transformación inversa de los operadores como

$$c_{d,i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{d,\mathbf{k}\sigma} \quad (117)$$

$$c_{p,i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{p,\mathbf{k}\sigma}. \quad (118)$$

La condición de periodicidad nos permite tener que

$$c_{d,i+1\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{d,\mathbf{k}\sigma} \quad (119)$$

$$c_{p,i+1\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{p,\mathbf{k}\sigma}. \quad (120)$$

usando relación de ortogonalidad

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{i}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_i} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}, \quad (121)$$

con lo cual se obtiene el siguiente Hamiltoniano BdG-TB

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(t_d c_{d,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{d,\mathbf{k}\sigma} + t_p c_{p,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{p,\mathbf{k}\sigma} + t c_{d,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{p,\mathbf{k}\sigma} + e^{-ika} t' c_{p,\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{d,\mathbf{k}\sigma} \right. \\ & + \Delta_d^* c_{d,\mathbf{k}\downarrow} c_{d,\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_p^* c_{p,\mathbf{k}\downarrow} c_{p,\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{p,\mathbf{k}\downarrow} c_{d,\mathbf{k}\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{d,\mathbf{k}\downarrow} c_{p,\mathbf{k}\uparrow} \\ & \left. + e^{-ika} \Delta_{\mathbf{k}}'^* c_{p,\mathbf{k}\downarrow} c_{d,\mathbf{k}\uparrow} + e^{+ika} \Delta_{\mathbf{k}}'^* c_{d,\mathbf{k}\downarrow} c_{p,\mathbf{k}\uparrow} + h.c. \right), \quad (122) \end{aligned}$$

Para obtener una expresión compacta y usar siempre el subíndice en los operadores realizamos la

siguientes definiciones

$$t_{\pm} = t + t' e^{\pm ika} \quad (123)$$

$$\Delta_{\pm}^* = \Delta^* + e^{\pm ika} \Delta'^* \quad (124)$$

ademas en la parte TB aparece el operador con momento positivo y espín hacia abajo, que en contraste con el de superconductividad que es de momento negativo y espín para abajo. Para reescribir esto con la norma de tener momento negativo con espín negativo, en los que tengan espín negativo introducimos un cambio en la la sumatoria de $-\mathbf{k}$ con $-\mathbf{k}$; como la suma barre de menos infinito hasta infinito podemos volver a unir todas las sumas y realizar la siguiente definición

$$\mathbf{k} \uparrow = \mathbf{k} \quad (125)$$

$$-\mathbf{k} \downarrow = -\mathbf{k} \quad (126)$$

obteniendo este Hamiltoniano más compacto

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} & (t_d c_{d,+k}^\dagger c_{d,+k} + t_p c_{p,+k}^\dagger c_{p,+k} + t_+ c_{d,+k}^\dagger c_{p,+k} + t_- c_{p,+k}^\dagger c_{d,+k} \\ & + t_d c_{d,-k}^\dagger c_{d,-k} + t_p c_{p,-k}^\dagger c_{p,-k} + t_- c_{d,-k}^\dagger c_{p,-k} + t_+ c_{p,-k}^\dagger c_{d,-k} \\ & + \Delta_d c_{d,+k}^\dagger c_{d,-k}^\dagger + \Delta_p c_{p,+k}^\dagger c_{p,-k}^\dagger + \Delta_+ c_{d,+k}^\dagger c_{p,-k}^\dagger + \Delta_- c_{p,+k}^\dagger c_{d,-k}^\dagger + h.c.) \end{aligned}$$

El siguiente objetivo es diagonalizar el Hamiltoniano, lo cual nos dará el espectro de energía. Para ello usamos el proceso mencionado en [24], para Hamiltonianos cuadráticos fermionicos.

Comenzamos por construir el Hamiltoniano como

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \alpha^\dagger \hat{M} \alpha, \quad (127)$$

en una base extendida, esta base es formada por los operadores de destrucción y creación en un vector fila de manera que la base para este sistema es

$$\alpha = \begin{pmatrix} c_{d,+k} \\ c_{p,+k} \\ c_{d,-k} \\ c_{p,-k} \\ c_{d,+k}^\dagger \\ c_{p,+k}^\dagger \\ c_{d,-k}^\dagger \\ c_{p,-k}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (128)$$

En esta base se escribe la matriz \hat{M} , siendo necesario tenerlo en una forma especial dado por

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix}. \quad (129)$$

Estas matrices vienen dadas por

$$A = \begin{pmatrix} t_d & t_+ & 0 & 0 \\ t_- & t_p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_d & t_- \\ 0 & 0 & t_+ & t_p \end{pmatrix}. \quad (130)$$

y

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \Delta_d^* & \Delta_+^* \\ 0 & 0 & \Delta_-^* & \Delta_p^* \\ -\Delta_d^* & -\Delta_-^* & 0 & 0 \\ -\Delta_+^* & -\Delta_p^* & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (131)$$

Los vectores propios de la matriz \hat{M} (ecuación 129) será la transformación que diagonaliza el Hamiltoniano y los valores propios nos permitirá encontrar el espectro. Los valores propios de estos problemas tiene como propiedad que para cada valor propio E_n existe uno que notaremos $-E_n$ ya que tiene el mismo valor absoluto. La energía del estado base está dada por la siguiente ecuación

$$E_0 = \frac{1}{2} \text{Tr}(A) - \frac{1}{2} \sum_{n>0} E_n \quad (132)$$

para los vectores propios que notaremos U_n para el correspondiente E_n y V_n para el correspondiente $-E_n$. La transformación de Bogoliubov se define como

$$\gamma_n^\dagger = \alpha^\dagger U_n = V_n^\dagger \alpha \quad (133)$$

$$\gamma_n = U_n^\dagger \alpha = V_n \alpha^\dagger \quad (134)$$

$$(135)$$

De forma que sólo es necesario los vectores propios positivos para realizar la transformación. Con esto el Hamiltoniano transformado a la base de γ_n queda escrito como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} E_n \gamma_n^\dagger \gamma_n + E_0. \quad (136)$$

Los valores propios de M se puede escribir como el determinante de la siguiente matriz de bloques que se ha reorganizado

$$\hat{M} - E\hat{I} = \begin{pmatrix} C_0 & 0 \\ 0 & C_1 \end{pmatrix}, \quad (137)$$

en donde el determinante es dado por

$$|\hat{M} - E\hat{I}| = |C_0| |C_1|. \quad (138)$$

con las matrices C_0 y C_1 definidas como

$$C_0 = \begin{vmatrix} t_d - E & t_+ & \Delta_d & \Delta_+ \\ t_- & t_p - E & \Delta_- & \Delta_p \\ \Delta_d^* & \Delta_-^* & -t_d - E & -t_+ \\ \Delta_+^* & \Delta_p^* & -t_- & -t_p - E \end{vmatrix} \quad (139)$$

$$C_1 = \begin{vmatrix} -t_d - E & -t_- & -\Delta_d^* & -\Delta_+^* \\ -t_+ & -t_p - E & -\Delta_-^* & -\Delta_p^* \\ -\Delta_d & -\Delta_- & t_d - E & t_- \\ -\Delta_+ & -\Delta_p & t_+ & t_p - E \end{vmatrix}. \quad (140)$$

Los determinantes de las matrices anteriores se pueden escribir como

$$E^4 - A_2 E^2 \pm A_1 E + A_0 = 0 \quad (141)$$

Escribiendo los potenciales como

$$\Delta_p = |\Delta_p| e^{i\varphi_p} \quad (142)$$

$$\Delta_d = |\Delta_d| e^{i\varphi_d} \quad (143)$$

$$\Delta = |\Delta| e^{i\varphi} \quad (144)$$

$$\Delta' = |\Delta'| e^{i(\varphi+\phi)} \quad (145)$$

$$(146)$$

los coeficientes son dados por

$$\begin{aligned}
A_2 &= -t_d^2 - t_p^2 - 2(t^2 + t'^2 + 2tt' \cos[ak]) - \Delta_d^2 - \Delta_p^2 - 2\Delta^2 - 2\Delta'^2 - 4\Delta\Delta' \cos[ak] \cos[\phi] \\
A_1 &= 4(\Delta_d) \sin[ak](-t\Delta' \sin[\varphi_d - \varphi - \phi] + t'\Delta \sin[\varphi_d - \varphi]) \\
&\quad -4(\Delta_p) \sin[ak](-t\Delta' \sin[\varphi_p - \varphi - \phi] + t'\Delta \sin[\varphi_p - \varphi]) - \Delta\Delta'(t_d - t_p)(\sin[ak] \sin[\phi]) \\
A_0 &= t_d^2 t_p^2 + (t^2 + t'^2 + 2tt' \cos[ak])^2 + t_p^2 \Delta_d^2 + t_d^2 \Delta_p^2 + 2(\Delta^2 t^2 + \Delta'^2 t'^2 + 2tt'(\Delta^2 + \Delta'^2) \cos[ak]) \\
&\quad + (\Delta'^2 t^2 + t'^2 \Delta^2) \cos[2ak] + 2\Delta' \cos[\phi]((t^2 + t'^2) \cos[ak] + 2tt') \\
&\quad - 2t_d t_p (t^2 + t'^2 + 2tt' \cos[ak]) - 4(\Delta_d) t \Delta \cos[\varphi_d - \varphi] - 4(\Delta_p) \cos[ak] (t \Delta' \cos[\varphi_d - \varphi - \phi] \\
&\quad + t' \Delta \cos[\varphi_d - \varphi]) - 4(\Delta_d) t' \Delta' \cos[\varphi_d - \varphi - \phi] - 4(\Delta_p) t \Delta \cos[\varphi_p - \varphi] \\
&\quad - 4(\Delta_p) \cos[ak] (t \Delta' \cos[\varphi_p - \varphi - \phi] + t' \Delta \cos[\varphi_p - \varphi]) - 4(\Delta_p) t' \Delta' \cos[\varphi_p - \varphi - \phi] \\
&\quad + 2(t^2 + t'^2 + 2tt' \cos[ak]) \Delta_d \Delta_p \cos[\varphi_d - \varphi_p] + t_d t_p (2\Delta^2 + 2\Delta'^2 + 4\Delta\Delta' \cos[ak] \cos[\phi]) \\
&\quad + |\Delta_d|^2 |\Delta_p|^2 - 2\Delta_d \Delta_p (\Delta^2 \cos[-2\varphi + \varphi_p + \varphi_d] + 2\Delta\Delta' \cos[ak] \cos[-\phi - 2\varphi + \varphi_p + \varphi_d] \\
&\quad + \Delta'^2 \cos[-2\phi - 2\varphi]) + (\Delta^2 + \Delta'^2 + 2\Delta\Delta' \cos[ak + \phi]) (\Delta^2 + \Delta'^2 + 2\Delta\Delta' \cos[ak - \phi]).
\end{aligned}$$

Dado que ϕ es la diferencia de fase entre los potenciales Δ y Δ' , y que resulta de particular importancia para analizar los resultados.

Nuestro sistema tiene ocho valores propios en general si $A_1 \neq 0$. La comparación entre el modelo de electrones cuasi-libres, muestra que posee la misma forma de

$$E^4 - A_2 E^2 + A_1 E + A_0 = 0 \quad (147)$$

Para nuestro sistema el término A_1 determina la cantidad de valores propios. Debido al resultado mostrado en el proceso de diagonalización obtenemos que nuestro sistema está compuesto por la misma cantidad de valores propios positivos que negativos, pero los negativos no corresponden a estados de las excitaciones elementales.

Para que $A_1 = 0$ se necesita que la diferencia de fase de los potenciales de pares del sistema sean cero o π . En este caso obtenemos solo cuatro valores propios los cuales están degenerados, es decir, para cada valor propio existen dos vectores propios. Recordando el estudio en el marco teórico para la transformación de Bogoliubov, obtenemos que la transformación que diagonaliza el Hamiltoniano posee esa misma degeneración. En ese caso la creación de cuasi-partículas tenía simetría para las dos formas de excitación, las cuales eran de electrón con momento \mathbf{k} y otra con momento $-\mathbf{k}$. En este caso tiene el mismo significado, sólo que tenemos dos bandas y por lo tanto tenemos una simetría para cada cuasi-partícula creada en cada banda según sea el caso.

Si $A_1 \neq 0$ obtenemos ocho valores propios lo que significa que se ha roto la simetría para las dos formas de excitación esto se aprecia en la figura 17 [25]. En el caso que tengamos energía degenerada

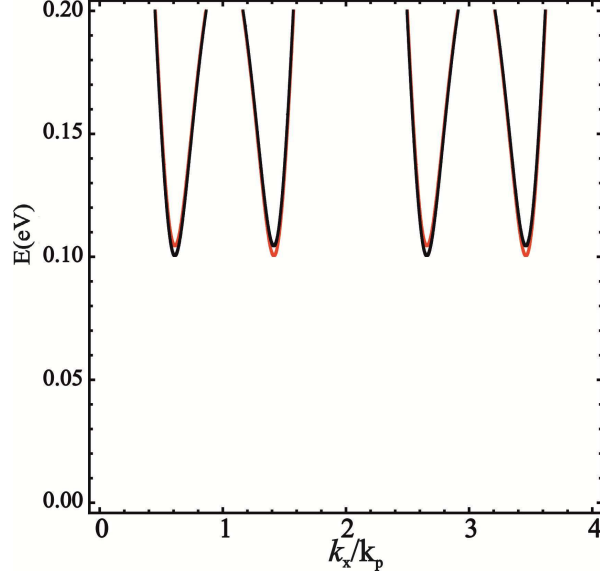


Figura 17: Espectro de energía para el caso de potenciales de pares con diferentes fases, en este caso se obtiene ocho bandas de las cuales solo cuatro están por encima del nivel de Fermi. De estas cuatro debido al potencial de pares se genera unas diferencias sobre la brecha superconductor que se muestran por variaciones de la brecha para el caso rojo con $+A_1$ del caso negro para $-A_1$

las cuasi-partículas independiente del espín posee la misma energía para la creación, pero cuando la energía no está degenerada entonces tenemos que una cuasi-partícula requiere menos energía para ser creada.

Comenzaremos nuestro análisis realizando un proceso que es similar al caso de la aproximación de electrones cuasi-libres. Comenzaremos por resolver nuestro sistema cuando los potenciales de pares son cero, con lo cual el espectro de energía está dado por

$$E^4 + (-t_d^2 - t_p^2 - 2t_-t_+) E^2 + t_d^2 t_p^2 + t_-^2 t_+^2 - 2t_d t_p t_+ t_- = 0. \quad (148)$$

el cual se puede resolver fácilmente obteniendo

$$E^2 = \frac{1}{2} \left((t_d^2 + t_p^2 + 2t_-t_+) - \sqrt{(t_d^2 - t_p^2)^2 + 4(t_d + t_p)^2 t_-t_+} \right) \quad (149)$$

con un trabajo algebraico se puede demostrar que ésto corresponde al cuadrado de la solución de un modelo TB sin superconductividad del sistema, es decir, se tiene que la energía calculada es de la forma

$$E = |e_l|, \quad (150)$$

siendo e_l la solución del modelo TB sin superconductividad, dada por

$$e_l = \sqrt{\frac{1}{2} \left((t_d^2 + t_p^2 + 2t_- t_+) - \sqrt{(t_d^2 - t_p^2)^2 + 4(t_d + t_p)^2 t_- t_+} \right)} \quad (151)$$

el cual se puede simplificar como

$$e_l = \frac{1}{2} \left((t_d + t_p) \pm \sqrt{(t_d - t_p)^2 - 4t_- t_+} \right). \quad (152)$$

Para obtener la superficie de Fermi resolvemos la ecuación

$$e_l = 0, \quad (153)$$

de esta forma se puede obtener el mismo resultado que el cálculo de las superficies de Fermi realizado en el marco teórico.

En general para todo espectro de energía que se obtenga como los ceros de un polinomio, es decir,

$$P[E(kx, ky, kz, E_F), n] = 0, \quad (154)$$

siendo n el orden del polinomio en la variable de energía, la superficie de Fermi se puede obtener al hacer los potenciales de pares cero y resolver la ecuación.

$$P[0, n] = A_0 = 0. \quad (155)$$

Analicemos ésto para nuestra red unidimensional. En la figura 18 dibujamos el valor del espectro para e_l en azul y $-e_l$ en rojo, ésto sería lo equivalente a nuestras parábolas es decir la solución tipo electrónica y de huecos de nuestra red, cuando no tenemos superconductividad. Estas dos coinciden con las que obtenemos si en la ecuación del espectro de superconductividad hacemos los potenciales de pares igual a cero, figura 18 en negro. El punto de cruce de estos tres casos está en $E = 0$, de igual manera que, con las parábolas para el caso de la brecha superconductora en el modelo de electrones cuasi-libres, con lo cual hemos confirmado el resultado. La razón es que al hacer el potencial de pares cero siempre obtenemos el espectro de energía del material para electrones y huecos superpuestos, y los vectores de onda para los cuales la energía valga cero pertenecerán a la superficie de Fermi.

Es de notar que en este proceso se obtiene que las ecuaciones son equivalentes excepto por un cuadrado, es decir, la ecuación obtenida por la ecuación (155) siempre es de la forma

$$(E_n - E_F)^2 = 0, \quad (156)$$

siendo $E_n - E_F = 0$ la ecuación que usualmente se utiliza para encontrar la superficie de Fermi, donde E_n es la energía de la banda sin incluir la energía de Fermi. Para el caso que estamos analizando la ecuación para encontrar nuestro espectro de energía es

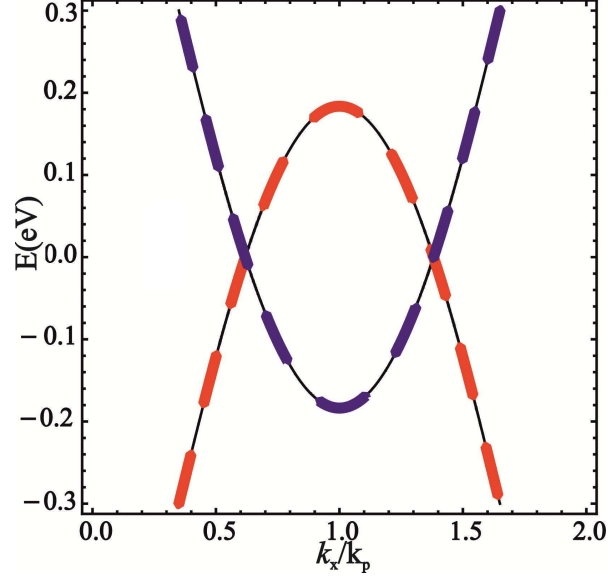


Figura 18: Obtenemos los resultados de una red dimensional sin superconductividad y se obtiene el espectro e_i (electrones en azul) y $-e_i$ (huecos en rojo). De igual manera se utiliza el espectro encontrado para el caso de superconductividad (negro) con los potenciales de pares igualados a cero. Se nota que la línea roja y azul se cruza en cero, de igual manera que la de superconductividad con el potencial de pares igualado a cero; que corresponde a la energía de Fermi.

$$t_d^2 t_p^2 + t_-^2 t_+^2 - 2t_d t_p t_+ t_- = 0. \quad (157)$$

y en donde los parámetro de acople al mismo sitio presenta la energía de Fermi $t_i = t_i - E_F$, al reemplazar las definiciones de t_{\pm} obtenemos

$$t_d t_p - 2t^2(1 - \cos(ak)) = 0. \quad (158)$$

La anterior ecuación es equivalente a la obtenida para los electrones quasi-libres con la principal diferencia de depender del parámetro de acople entre sitio. Los estados electrón hueco estarán presentes en el material si tenemos condiciones de un parámetro de acople mínimo entre átomos vecinos, es decir, un bajo tunelamiento de los electrones entre átomos harán que los estados electrónicos no crucen la energía de Fermi de forma análoga a la aproximación de electrones quasi-libres. Debemos considerar que al ser este problema unidimensional se obtienen puntos y no líneas como en el caso bidimensional o superficies como el caso tridimensional.

Para determinar el parámetro de acople mínimo y obtener que la banda cruce la energía de Fermi para obtener estados de superconductividad, se busca el mínimo valor que puede tener t tal que con

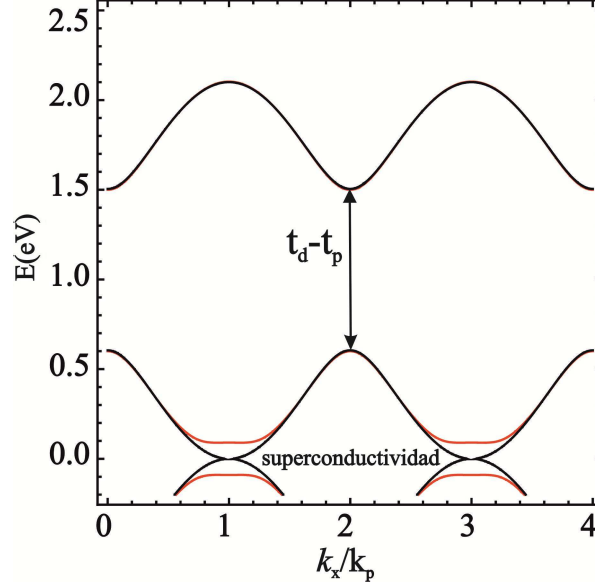


Figura 19: En la escogencia de los valores para los dos diferentes potenciales delta que dependen del vector de la red reciproca obtenemos que mientras uno cambia los vectores de onda donde se excita el par, el otro destruye la superconductividad. El parámetro de acople se escoge 0.1ev por encima del valor de t_m

el máximo valor de $\cos(ak)$ se pueda resolver la ecuación (158), lo cual corresponde a

$$t_{min} = \sqrt{t_d t_p / 4} \quad (159)$$

Finalmente estamos listos para realizar los análisis correspondientes, comenzamos por escoger un valor de t y t' que logren generar cuasi-partículas electrón hueco. En el proceso de escoger los términos para obtener valores es de notar que la escogencia de Δ' y Δ , generan efectos sobre el mismo parámetro de acople mínimo para obtener superconductividad. Para entender ésto ubicamos el parámetro de acople en los valores mínimos para obtener cuasi-partículas. Posteriormente escogemos los potenciales $\Delta = \Delta'$ y $\Delta = -\Delta'$ dejando los otros potenciales de pares como cero, con ésto se obtiene la figura 19.

Esta situación indica que de los dos casos que quedaban uno mantiene el espectro de un superconductor, mientras el otro nos crea una situación donde el potencial de pares que debería crear una brecha para los estados excitados no existe. En la aproximación de electrones cuasi-libres obtenemos una segunda brecha el cual coincide con las deformaciones de la superficie de Fermi. En esta aproximación no obtenemos cambios de la superficie para diferentes valores de t .

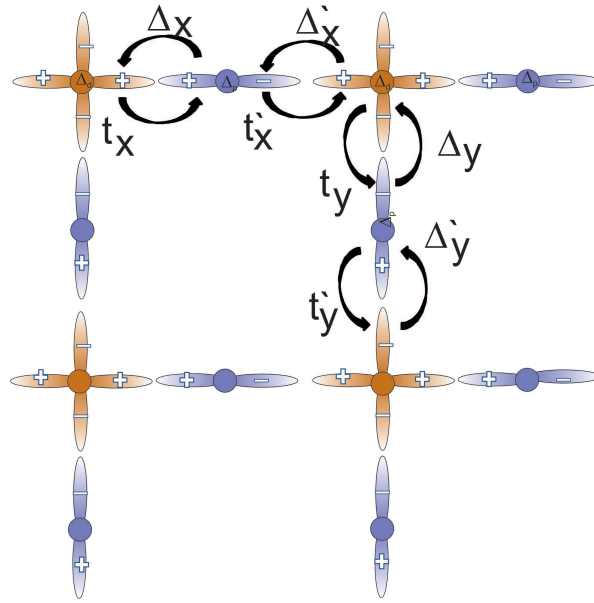


Figura 20: Red bidimensional de dos tipos atómicos que se entrelazan con orbitales tipo p y d . Este caso es una extensión del unidimensional donde se consideran las mismas formas de parámetros de acople para las dos direcciones

4.2. Sistema bidimensional

Después de los resultados anteriores es interesante resolver el problema del plano de cobre con oxígeno presente en varios superconductores H-Tc. Este problema se ha resuelto de varias maneras [22] pero en particular en este caso se partirá completamente de un modelo microscópico usando los potenciales de forma parecida a la cadena unidimensional.

Comenzaremos como el problema anterior con una interacción a primeros vecinos, en este caso tenemos mas vecinos para cada átomo con lo cual hacemos una distinción por direcciones, la siguiente figura muestra todos los parámetros de acople involucrados, así como la dirección escogida.

El Hamiltoniano está dado por

$$\begin{aligned}
\hat{H} = \sum_{i,j} \left\{ \sum_{\sigma} \left[t_d c_{d,i,j\sigma}^{\dagger} c_{d,i,j\sigma} + t_{px} c_{px,i,j\sigma}^{\dagger} c_{px,i,j\sigma} + t_{py} c_{py,i,j\sigma}^{\dagger} c_{py,i,j\sigma} \right. \right. \\
+ t_x c_{d,i,j,\sigma}^{\dagger} c_{px,i,j,\sigma} + t_y c_{d,i,j,\sigma}^{\dagger} c_{py,i,\sigma} t'_x c_{px,i,j,\sigma}^{\dagger} c_{d,i+1,j,\sigma} + t'_y c_{p,i,j,\sigma}^{\dagger} c_{d,i,j+1,\sigma} + h.c. \left. \right] \\
+ \Delta_d c_{d,i,j\uparrow}^{\dagger} c_{d,i,j\downarrow}^{\dagger} + \Delta_{px} c_{px,i,j\uparrow}^{\dagger} c_{px,i,j\downarrow}^{\dagger} + \Delta_{py} c_{py,i,j\uparrow}^{\dagger} c_{py,i,j\downarrow}^{\dagger} \\
+ \Delta_x c_{d,i,j\uparrow}^{\dagger} c_{px,i,j\downarrow}^{\dagger} + \Delta_x c_{px,i,j\uparrow}^{\dagger} c_{d,i,j\downarrow}^{\dagger} + \Delta_y c_{d,i,j\uparrow}^{\dagger} c_{py,i,j\downarrow}^{\dagger} + \Delta_y c_{py,i,j\uparrow}^{\dagger} c_{d,i,j\downarrow}^{\dagger} \\
+ \Delta'_x c_{d,i+1,j\uparrow}^{\dagger} c_{px,i+1,j\downarrow}^{\dagger} + \Delta'_x c_{px,i,j\uparrow}^{\dagger} c_{d,i+1,j\downarrow}^{\dagger} + \Delta'_y c_{d,i,j+1\uparrow}^{\dagger} c_{py,i,j\downarrow}^{\dagger} + \Delta'_y c_{py,i,j\uparrow}^{\dagger} c_{d,i,j+1\downarrow}^{\dagger} + h.c. \left. \right\} \quad (160)
\end{aligned}$$

donde los potenciales de pares no locales son Δ_x , Δ'_x y Δ_y , Δ'_y acoplan pares en la dirección x ó y respectivamente.

Al realizar la siguiente transformación a una base de Bloch

$$c_{d,i,j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{i,j}} c_{d,\mathbf{k}\sigma} \quad (161)$$

$$c_{px,i,j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{i,j}} c_{px,\mathbf{k}\sigma} \quad (162)$$

$$c_{py,i,j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{i,j}} c_{py,\mathbf{k}\sigma}, \quad (163)$$

y al usar las usuales relaciones de ortogonalidad, periodicidad y el mismo cambio para el momento como en la red unidimensional, se obtiene el Hamiltoniano

$$\begin{aligned}
\hat{H} = \sum_k \left\{ \sum_{\sigma} \left[t_d c_{d,\sigma k}^{\dagger} c_{d,\sigma k} + t_{px} c_{px,\sigma k}^{\dagger} c_{px,\sigma k} + t_{py} c_{py,\sigma k}^{\dagger} c_{py,\sigma k} \right. \right. \\
+ t_x c_{d,\sigma k}^{\dagger} c_{px,\sigma k} + t_y c_{d,\sigma k}^{\dagger} c_{py,\sigma k} + t'_x e^{-ika} c_{px,k,\sigma}^{\dagger} c_{d,k,\sigma} + e^{-ikb} t'_y c_{py,k,\sigma}^{\dagger} c_{d,k,\sigma} + h.c. \left. \right] \\
+ \Delta_d c_{d,k}^{\dagger} c_{d,-k}^{\dagger} + \Delta_{px} c_{px,k}^{\dagger} c_{px,-k}^{\dagger} + \Delta_{py} c_{py,k}^{\dagger} c_{py,-k}^{\dagger} \\
+ \Delta_x c_{d,k}^{\dagger} c_{px,-k}^{\dagger} + \Delta_x c_{px,k}^{\dagger} c_{d,-k}^{\dagger} + \Delta_y c_{d,k}^{\dagger} c_{py,-k}^{\dagger} + \Delta_y c_{py,k}^{\dagger} c_{d,-k}^{\dagger} \\
+ e^{ika} \Delta'_x c_{d,k}^{\dagger} c_{px,-k}^{\dagger} + e^{-ika} \Delta'_x c_{px,k}^{\dagger} c_{d,-k}^{\dagger} + e^{ika} \Delta'_y c_{d,k}^{\dagger} c_{py,-k}^{\dagger} + e^{-ika} \Delta'_y c_{py,k}^{\dagger} c_{d,-k}^{\dagger} + h.c. \left. \right\} \quad (164)
\end{aligned}$$

Haciendo las siguientes definiciones,

$$t_{\pm x} = t_x + t'_x e^{\pm ika} \quad (165)$$

$$t_{\pm y} = t_y + t'_y e^{\pm ikb} \quad (166)$$

$$\Delta_{\pm x} = \Delta_x + e^{\pm ika} \Delta'_x \quad (167)$$

$$\Delta_{\pm y} = \Delta_y + e^{\pm ikb} \Delta'_y, \quad (168)$$

obtenemos el siguiente Hamiltoniano más compacto

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_k \left\{ \sum_{\sigma} \left(t_d c_{d,\sigma k}^{\dagger} c_{d,\sigma k} + t_{px} c_{px,\sigma k}^{\dagger} c_{px,\sigma k} + t_{py} c_{py,\sigma k}^{\dagger} c_{py,\sigma k} \right. \right. \\ \left. \left. + t_{\sigma x} c_{d,\sigma k}^{\dagger} c_{px,\sigma k} + t_{\sigma y} c_{d,\sigma k}^{\dagger} c_{py,+k} + h.c. \right) \right. \\ \left. + \Delta_d c_{d,+k}^{\dagger} c_{d,-k}^{\dagger} + \Delta_{px} c_{px,+k}^{\dagger} c_{px,-k}^{\dagger} + \Delta_{py} c_{py,+k}^{\dagger} c_{py,-k}^{\dagger} \right. \\ \left. + \Delta_{+x} c_{d,+k}^{\dagger} c_{px,-k}^{\dagger} + \Delta_{-x} c_{px,+k}^{\dagger} c_{d,-k}^{\dagger} + \Delta_{+y} c_{d,+k}^{\dagger} c_{py,-k}^{\dagger} + \Delta_{-y} c_{py,+k}^{\dagger} c_{d,-k}^{\dagger} + h.c. \right\} \quad (169) \end{aligned}$$

Para diagonalizar el hamiltoniano hacemos el mismo procedimiento de la sección anterior en donde escribimos operadores α en la base extendida dada por

$$\alpha = \begin{pmatrix} c_{d,+k} \\ c_{px,+k} \\ c_{py,+k} \\ c_{d,-k} \\ c_{px,-k} \\ c_{py,-k} \\ c_{d,+k}^{\dagger} \\ c_{px,+k}^{\dagger} \\ c_{py,+k}^{\dagger} \\ c_{d,-k}^{\dagger} \\ c_{px,-k}^{\dagger} \\ c_{py,-k}^{\dagger} \end{pmatrix}. \quad (170)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \alpha^{\dagger} \hat{M} \alpha, \quad (171)$$

recordando que el hamiltoniano estara dado como

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} E_n \gamma_n^{\dagger} \gamma_n + E_0. \quad (172)$$

En esta base se escribe la matriz \hat{M} debera tener la forma

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} A & B \\ -B^* & -A^* \end{pmatrix}, \quad (173)$$

que para este problema esta dado por

$$A = \begin{pmatrix} t_d & t_{+x} & t_{+y} & 0 & 0 & 0 \\ t_{-x} & t_{px} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t_{-y} & 0 & t_{py} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_d & t_{-x} & t_{-y} \\ 0 & 0 & 0 & t_{+x} & t_{px} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_{+y} & 0 & t_{py} \end{pmatrix}, \quad (174)$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \Delta_d^* & \Delta_{+x}^* & \Delta_{+y}^* \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_{-x}^* & \Delta_{px}^* & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_{-y}^* & 0 & \Delta_{py}^* \\ -\Delta_d^* & -\Delta_{-x}^* & -\Delta_{-y}^* & 0 & 0 & 0 \\ -\Delta_{+x}^* & -\Delta_{px}^* & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\Delta_{+y}^* & 0 & -\Delta_{py}^* & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (175)$$

El Hamiltoniano en este caso es representado por una matriz 12x12 que al igual que en el anterior se puede encontrar los valores propios al desarrollar el determinante como el producto de dos 6x6. Que el Hamiltoniano sea separable en dos matrices más pequeñas para los cálculos no es coincidencia, el efecto de no tener cambios en los espines por fenómenos magnéticos siempre conlleva al determinante de dos matrices. Los valores propios del Hamiltoniano son

$$E^6 + A_4 E^4 \pm A_3 E^3 + A_2 E^2 \pm A_1 E + A_0 \quad (176)$$

Los valores de los coeficientes se muestran en el anexo D. Al igual que en el caso anterior tenemos dos posibilidades las cuales se degeneran si el potencial de pares es real, por lo que asumiendo el caso que obtuvo el mayor impacto en la red unidimensional para estados degenerados con lo cual escogemos potenciales de pares reales y hacemos las siguientes definiciones

$$t_{\pm x} = t_x (1 + \alpha e^{\pm iak_x}) \quad (177)$$

$$t_{\pm y} = t_y (1 + \alpha e^{\pm i b k_y}) \quad (178)$$

$$\Delta_{\pm x} = \Delta_x (1 + \alpha e^{\pm i a k_x}) \quad (179)$$

$$\Delta_{\pm y} = \Delta_y^* (1 + \alpha e^{\pm i b k_y}). \quad (180)$$

Al momento de reemplazar aparecerán el producto de funciones las cuales definimos como

$$g = (1 + k e^{i a k}) (1 + \alpha e^{-i a k_x}) \quad (181)$$

$$h = (1 + k e^{i b k}) (1 + \alpha e^{-i b k_y}) \quad (182)$$

Con todos los potenciales de pares reales y las definiciones anteriores obtenemos que los coeficientes $A_3 = 0$, $A_1 = 0$ y los demás están dados por

$$A_4 = (-t_d^2 - 2t_p^2 - 2t_x^2 g - 2t_y^2 h - \Delta_d^2 - \Delta_{px}^2 - \Delta_{py}^2 - 2\Delta_x^2 g - 2\Delta_y^2 h) \quad (183)$$

$$\begin{aligned} A_2 = & t_p^4 + 2t_d^2 t_p^2 + 2\Delta_d^2 t_p^2 + (\Delta_{px}^2 + \Delta_{py}^2) t_p^2 + 2t_p^2 (ht_y^2 + gt_x^2) \\ & + (\Delta_{px}^2 + \Delta_{py}^2) t_d^2 + t_x^4 g^2 + t_y^4 h^2 - 2t_d t_p (ht_y^2 + gt_x^2) \\ & + 2t_x^2 t_y^2 g h + 2\Delta_{py}^2 t_x^2 g + 2\Delta_{px}^2 t_y^2 h (bk_y) + \Delta_d^2 (\Delta_{px}^2 + \Delta_{py}^2) \\ & + \Delta_{px}^2 \Delta_{py}^2 + 2\Delta_{px} \Delta_d t_x^2 g + 2\Delta_d \Delta_{py} t_y^2 h \end{aligned} \quad (184)$$

$$\begin{aligned}
A_0 = & 2t_d t_p^3 t_x^2 g - t_p^2 t_x^4 g^2 - t_p^2 t_y^4 h^2 - \Delta_d^2 t_p^4 - \Delta_{px}^2 t_d^2 t_p^2 - \Delta_{py}^2 t_d^2 t_p^2 \\
& - \Delta_{py}^2 t_x^4 g^2 - \Delta_{px}^2 t_y^4 h^2 - 2t_p^2 t_x^2 \Delta_x^2 g^2 - 2t_p^2 t_y^2 \Delta_y^2 h^2 \\
& - t_d^2 t_p^4 + 2t_d t_p^3 t_y^2 h + 4(\Delta_d t_p^3 t_x \Delta_x g) - 2t_d t_p^3 \Delta_x^2 g \\
& + 4(\Delta_d t_p^3 t_y \Delta_y h) - 2t_0 t_1^3 \Delta_y^2 h - 2(\Delta_d t_p^2 \Delta_p t_x^2 g) \\
& + 4(\Delta_p t_d t_p^2 t_x \Delta_x g) - 2(\Delta_d t_p^2 \Delta_{py} t_y^2 h) + 4(\Delta_{px} t_d t_p^2 t_y \Delta_y h) \\
& - 8(\Delta_x t_p^2 t_x t_y \Delta_y g h) + 2t_p^2 t_y^2 \Delta_x^2 g h + 2t_p^2 t_x^2 \Delta_y^2 g h \\
& - \Delta_d^2 \Delta_{px}^2 t_p^2 - \Delta_d^2 \Delta_{py}^2 t_p^2 - \Delta_{px}^2 \Delta_{py}^2 t_d^2 + 2(\Delta_d \Delta_{px} t_p^2 \Delta_x^2 g) + 2(\Delta_d \Delta_{py} t_p^2 \Delta_y^2 h) \\
& - 2\Delta_{py}^2 t_x^2 \Delta_x^2 g^2 - 2\Delta_{px}^2 t_y^2 \Delta_y^2 h^2 - t_p^2 \Delta_x^4 g^2 - 2t_p^2 \Delta_y^4 h^2 \\
& - t_p^2 \Delta_x^2 \Delta_y^2 g h - 2t_p^2 t_x^2 t_y^2 g h + 2\Delta_{py}^2 t_d t_p^2 t_x^2 g \\
& + 2\Delta_{px}^2 t_p t_d t_y^2 h + 4(\Delta_{px} t_p t_x^2 t_y \Delta_y g h) - 4(\Delta_{px} t_p t_x t_y^2 \Delta_x g h) \\
& - 2(\Delta_{px} t_x^2 t_y^2 \Delta_{py} g h) - 4(\Delta_{py} t_p t_x^2 t_y \Delta_y g h) \\
& + 4(\Delta_{py} t_p t_x t_y^2 \Delta_x g h) + 4(\Delta_d \Delta_{px}^2 t_p t_x \Delta_x g) - 2(\Delta_{px} \Delta_d \Delta_{py}^2 t_x^2 g) \\
& + 4(\Delta_{px} \Delta_{py}^2 t_d t_x \Delta_x g) - 2\Delta_{py}^2 t_d t_p \Delta_x^2 g + 4(\Delta_d \Delta_{py}^2 t_p t_y \Delta_y h) \\
& - 2(\Delta_{py} \Delta_d \Delta_{px}^2 t_y^2 h) + 4(\Delta_{py} \Delta_{px}^2 t_d t_y \Delta_y h) - 2\Delta_{px}^2 t_d t_p \Delta_y^2 h \\
& + 4(\Delta_{px} t_p t_x \Delta_x \Delta_y^2 g h) - 4(\Delta_{px} t_p t_y \Delta_y \Delta_x^2 g h) \\
& + 4(\Delta_{py} t_p t_y \Delta_y \Delta_x^2 g h) - 4(\Delta_{py} t_p t_x \Delta_x \Delta_y^2 g h) \\
& + 2(\Delta_{px} \Delta_{py} t_x^2 \Delta_y^2 g h) - 4(\Delta_{px} \Delta_{py} t_x t_y \Delta_x \Delta_y g h) \\
& + 2(\Delta_{px} \Delta_{py} t_y \Delta_x^2 g h) - 4(\Delta_{px} \Delta_{py} t_x t_y \Delta_x \Delta_y g h) \\
& - \Delta_d^2 \Delta_{px}^2 \Delta_{py}^2 + 2(\Delta_d \Delta_{px} \Delta_{py}^2 \Delta_x g) + 2(\Delta_d \Delta_{py} \Delta_{px}^2 \Delta_y h) \\
& - \Delta_{py}^2 \Delta_x^4 g^2 - 2(\Delta_{px} \Delta_{py} \Delta_y^2 \Delta_x^2 g h) - \Delta_{px}^2 \Delta_y^4 h^4.
\end{aligned}$$

Comenzaremos por obtener la forma de la superficie de Fermi. Para ésto procedemos como el caso unidimensional obteniendo

$$-t_p^2 (t_d t_p - (t_x^2 g (ak_x) + t_y^2 h (bk_y)))^2 = 0. \quad (185)$$

En este caso es conveniente realizar figuras de esta ecuación debido a que su solución en el plano son líneas continuas y no un par de puntos. Se aprecia que a diferencia del caso anterior existen diferentes formas de superficies de Fermis dependiendo de los parámetros de acople. Las funciones $g(ak_x)$ y $g(bk_y)$ son de la forma $f(x) = 2 - 2\cos(x)$. Con ésto podemos tener al igual que en el primer caso valores de t_x y t_y para los cuales no tengamos los estados electrón hueco.

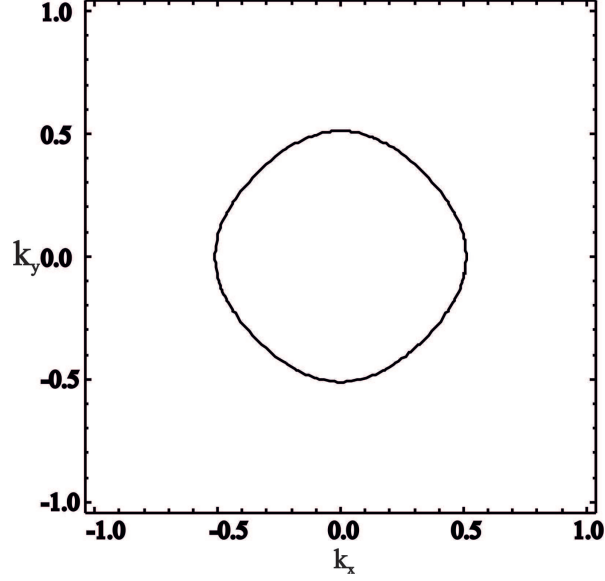


Figura 21: Forma de la superficie de Fermi para a los encontrados en la literatura para los planos CuO_2 los cuales son usualmente $t_d = -2,3eV$, $t_p = -0,9eV$, $t_x = -t_y = 1eV$ habiendo normalizado el tamaño de la red a la unidad

Se tienen principalmente tres formas de superficies de Fermi. Se escoge los valores correspondientes a los valores encontrados en la literatura para los planos CuO_2 los cuales son $t_d = -2,3eV$, $t_p = -0,9eV$, $t_x = -t_y = 1eV$ [22], con lo cual se obtiene la superficie de Fermi de la figura 22, en esta se aprecia que tenemos unas formas casi circulares las cuales se extienden en el plano. Cualquier dirección que se escoja para el vector de la red recíproca pasara por la superficie. Con esta información entonces se realiza la gráfica de bandas, las cuales se harán para las direcciones k_x , k_y y a 45 grados respecto la dirección k_x . Escogemos para el potencial de pares los valores de $\Delta_x = 0,005$ y $\Delta_y = 0,005$, con lo cual se observa en la figura 22

El espectro de esta figura es anisotrópico, pero existe una condición que genera espectros isotrópicos, en general cuando tenemos que

$$\frac{\Delta_x}{t_x} = \frac{\Delta_y}{t_y} \quad (186)$$

Obtenemos espectros superconductores isotrópicos para nuestro modelo.

Para observar esto graficamos el espectro de energía sobre la superficie de Fermi (figura 23), donde encontramos que tanto para los valores de Δ locales como para la condición de la ecuación 186, obtenemos una línea recta diferente a la obtenida para la condición de anisotropía de estos planos.

Las bandas de este sistema sin el potencial de pares han sido estudiadas [22], es de notar que la banda

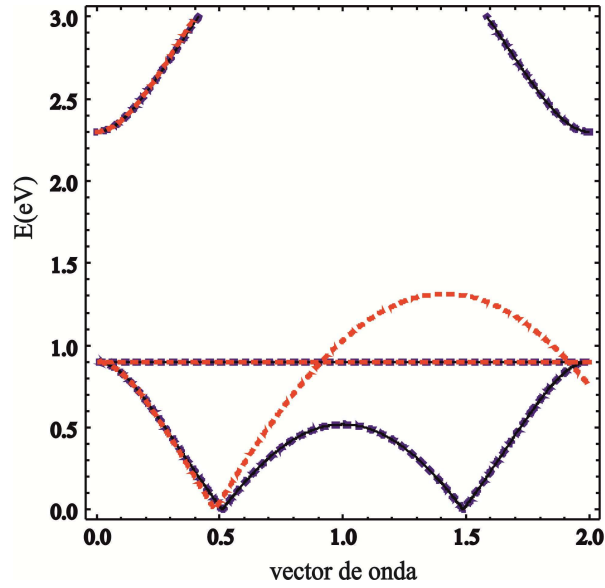


Figura 22: Espectro de energía para el caso de parámetros de acople correspondientes a los obtenidos en la literatura para los planos de CuO_2 , los cuales son $t_d = -2,3\text{eV}$, $t_p = -0,9\text{eV}$, $t_x = -t_y = 1\text{eV}$, tenemos el espectro para la dirección k_x en azul, k_y en rojo y por ultimo a un vector de onda de 45 grados respecto a k_x , todas las soluciones presentan superconductividad correspondiente al estado BCS usual, pero la de 45 grados presenta entre la segunda banda y la primera una brecha parecida al de las esferas de Andreev.

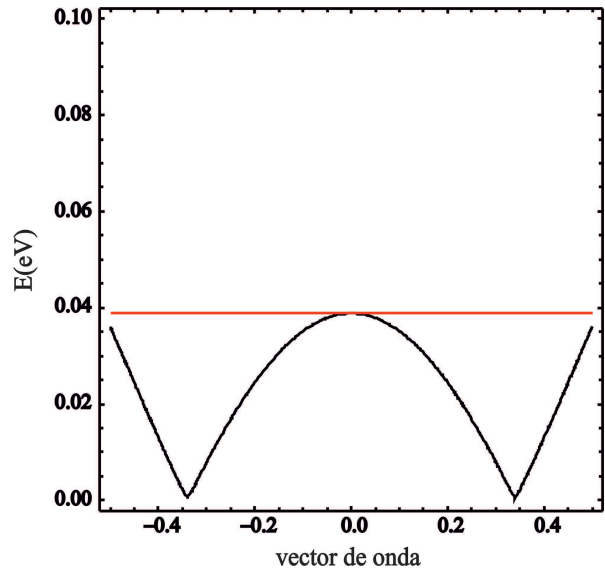


Figura 23: Espectro de energía para el caso de parámetros de acople correspondientes a los obtenidos en la literatura para los planos de CuO_2 , los cuales son $t_d = -2,3\text{eV}$, $t_p = -0,9\text{eV}$, $t_x = -t_y = 1\text{eV}$. El espectro es obtenido sobre la superficie de Fermi del cual se puede diferenciar el anisotrópico del isotrópico (línea recta), cuando el potencial de pares cumple $\Delta_x = \Delta_y$ o $\Delta_x = -\Delta_y$ respectivamente.

de la mitad corresponde en la práctica a un plano en ésta aproximación de primeros vecinos sin superconductividad. Es en superconductividad que ésta se deforma y toma otra forma, la banda más cerca al cero también resulta cambiada pero la tercera no es muy influenciada por la superconductividad.

La segunda banda se comporta como el caso de la banda extra de la esfera de Andreev para la aproximación de electrones cuasi-libres. Observando que el potencial de pares no local la deforma.

Para realizar un análisis extendido a casos que se parezcan el de los planos CuO_2 , se procederá a escoger valores que produzcan las dos restantes superficies de Fermi. Se comenzara por determinar los mínimos parámetros de acople para los cuales tengamos una superficie de Fermi, si los dos parámetros de acople para las dos direcciones fueran iguales obtendríamos que el mínimo parámetro de acople es

$$t_m = \sqrt{t_d t_p / 8}, \quad (187)$$

es importante resaltar que el resultado depende de las variaciones conjuntas de los parámetros de acople, es decir, el incremento de un parámetro de acople y la disminución del otro todavía puede originar brechas superconductoras.

Para el primer caso donde tenemos una superficie distinta de la del plano de CuO_2 escogemos los valores que generan una superficie de Fermi con la forma de la figura 24 en este caso debemos comenzar a disminuir el parámetro de acople en una sola dirección. La superficie de Fermi en este caso deja de cruzar para la dirección en la que se ha disminuido el parámetro de acople, con lo cual nuestro espectro a dos primeras bandas es la figura 25

Nuestro espectro de energía continúa manteniendo las características de tener brechas sobre la superficie de Fermi y la deformación de la segunda banda. Pero ahora tenemos que la dirección donde se ha reducido el valor del parámetro de acople en valor absoluto ha perdido la brecha superconductoras.

Para el último caso tenemos que la superficie de Fermi tiene la forma de la figura 26, en donde tenemos que la superficie de Fermi no presenta cortes en la dirección k_x y k_y pero si en la dirección de 45 grados respecto a k_x . El espectro es la figura 27 donde se observa que la segunda banda ya no es deformada por la superconductividad.

Entonces obtenemos como antes que los estados de superconductividad están sobre el nivel de Fermi, y se requiere valores mínimos del parámetro de acople para que se obtengan cuasi-partículas en esas direcciones. Si ambos parámetros de acople son pequeños entonces tenemos dos posibilidades, que el material no sea superconductor o que la superconductividad solo se de en direcciones que no pertenezcan al parámetro de acople. La alteración de la segunda brecha está relacionada con el parámetro de

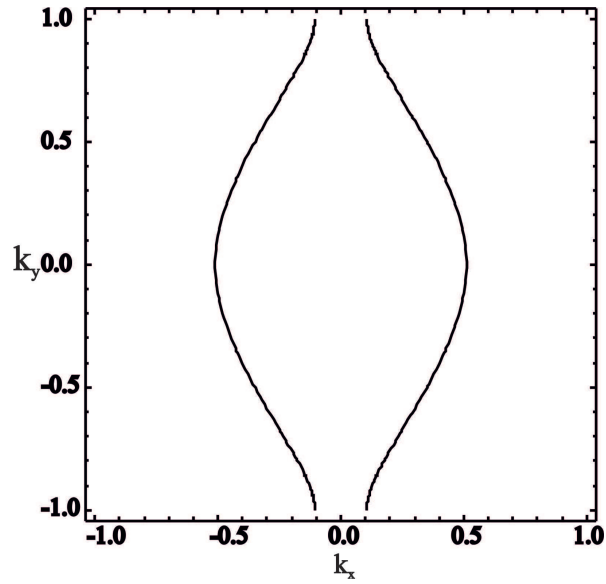


Figura 24: Superficie de Fermi para el caso de disminuir en valor absoluto el parámetros de acople en la dirección k_y un valor de $0.3eV$, es decir, $t_y = -0,7eV$, en este caso la superficie de Fermi no presenta cortes en la dirección al que se le bajo el parametro de acople.

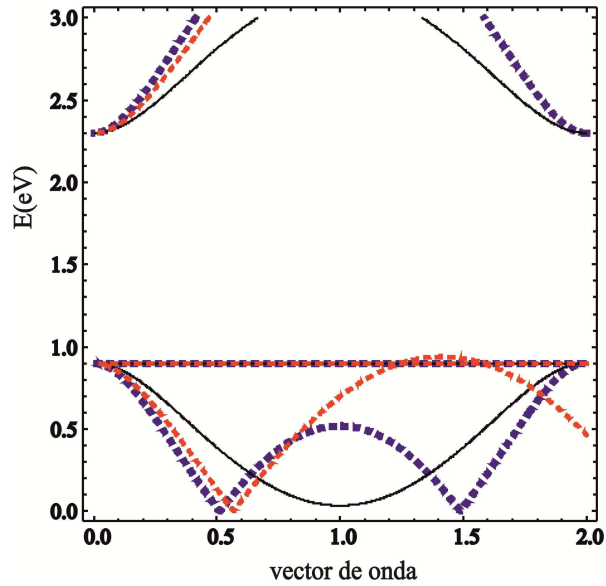


Figura 25: Espectro de energía para el caso de parámetros de acople correspondientes a $t_d = -2,3eV$, $t_p = -0,9eV$, $t_x = 1,5eV$, $t_y = -0,7eV$, tenemos el espectro para la dirección k_x en azul, k_y en rojo y por ultimo a un vector de onda de 45 grados respecto a k_x , debido a que en la dirección k_y no tenemos superficie de Fermi, no tenemos brecha superconductor en esa dirección.

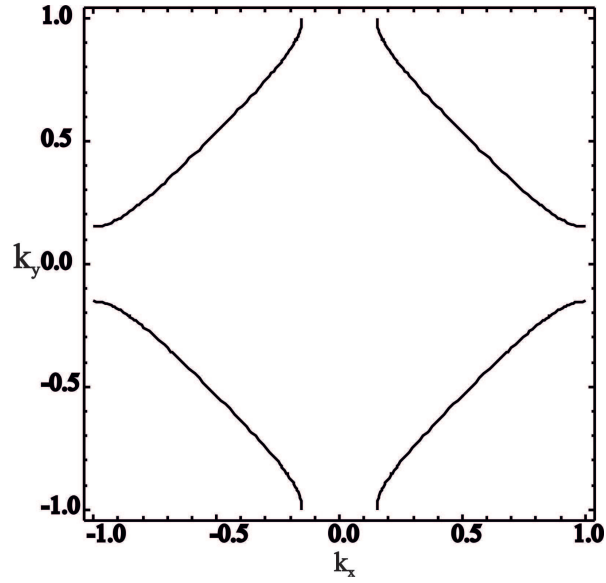


Figura 26: Superficie de Fermi para el caso de disminuir en valor absoluto de los parámetros de acople se han reducido en 0.3eV , es decir, $k_y = 0,7\text{eV}$ y $k_x = -0,7\text{eV}$, en este caso la superficie de Fermi no presenta cortes en las direcciones en las que se redujo el parámetro de acople, sin embargo, en la dirección de 45 grados sigue presentado cortes con la superficie de Fermi.

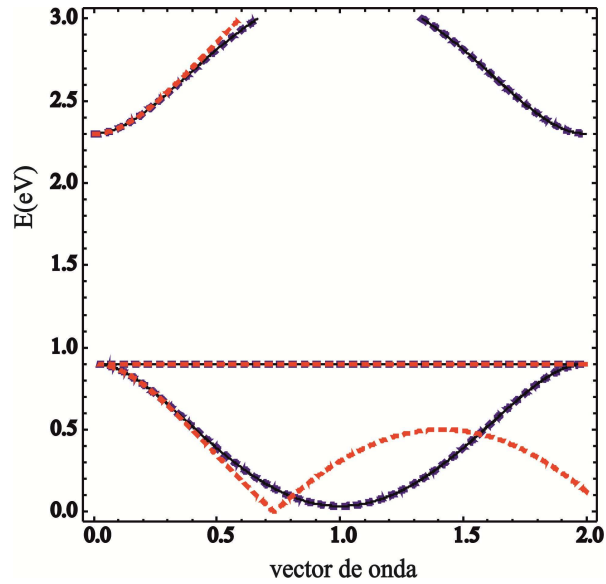


Figura 27: Espectro de energía para el caso de parámetros de acople correspondientes a $t_d = -2,3\text{eV}$, $t_p = -0,9\text{eV}$, $t_x = 0,7\text{eV}$, $t_y = -0,7\text{eV}$, tenemos el espectro para la dirección k_x en azul, k_y en rojo y por ultimo a un vector de onda de 45 grados respecto a k_x , solamente a 45 grados presenta superconductividad, las otras se tiene un mínimo pero no corresponde a uno superconductor y es en general mas alto que los de superconductividad.

acople, donde si este es grande entonces se obtiene entonces cambios en la segunda banda. La anisotropía sobre la superficie de Fermi no aparece cuando se colocan ambos potenciales de pares no locales con la relación (186), cualquier otra condición generan espectros anisotropicos.

Estos resultados contrastan con los del modelo de electrones cuasi-libres, ya que no era posible en el modelo de electrones cuasi-libres tener una condición donde no exista la superficie de Fermi. La energía donde está ubicada la esfera de Andreev depende del orden de la esfera y la energía de Fermi, pero en TB, se obtiene que la deformación de la segunda banda pasa siempre al mismo orden en energía y no se crean mas situaciones con cortes de esferas de mayor orden, para ello se requeriría que la tercera banda del modelo TB fuera cortada por la primera de huecos. La tercera y primera banda de huecos no podrán cortarse para valores reales del modelo, esto es debido a que poseen la misma forma y por lo tanto una se ubica siempre por debajo de la otra.

5. Conclusiones

1. En este trabajo se extendió la aproximación de electrones cuasi-libres a superconductores periódicos que pueden ser isotrópicos o anisotrópicos.
2. Adicionalmente se implemento un método con las ecuaciones de Bogoliubov de-Gennes para ser usadas en una aproximación “Tight Binding” y así poder contrastar estos resultados con los obtenidos en la aproximación de electrones cuasi-libres.
3. En la aproximación de electrones cuasi-libres encontramos, como es de esperarse la formación de una primera brecha tipo BCS, sobre la superficie de Fermi.
4. Las brechas anisotrópicas de los modelos en la aproximación de electrones cuasi-libres no corresponden a los usuales de la literatura, debido a que las diferentes formas de la superficie de Fermi obligan a escoger potenciales de formas complicadas y definidas por zonas.
5. Debido a la periodicidad de la red aparece, como es conocida, una brecha V_g debido a las reflexiones en planos de Bragg y una segunda brecha superconductora Δ_2 que es debido a reflexiones de Andreev entre cuasi-partículas tipo electrón en cuasi-partículas tipo hueco.
6. La brecha V_g debido a los planos de Bragg es poco afectada por la presencia de la superconductividad excepto cuando esta brecha se solapa con la segunda brecha superconductora.
7. La segunda brecha superconductora aparece en los estados que están cerca a una esfera de Andreev. Esta brecha es debida a las reflexiones electrón-hueco (Andreev) provenientes de dos sitios de red diferentes. El valor de la brecha depende de la expansión de Fourier del potencial de pares. Similar a como ocurre en el caso de un metal normal, pueden aparecer brechas de energía superconductores de mayor orden pero en contraste con las de Bragg están más cerca al nivel de Fermi, y dependen del valor de $\Delta_{\mathbf{k}_n}$.
8. Cuando la brecha superconductora en la esfera de Andreev y la brecha de Bragg coinciden, aparece un nivel intermedio entre la banda de conducción y la primera banda vacía que afecta la región de energía prohibida.
9. En el modelo “Tight Binding” al igual que en el de electrones cuasi-libres aparece la brecha BCS sobre la superficie de Fermi. La forma y existencia de la superficie de Fermi depende de los valores del parámetro de acople.
10. En el modelo “Tight Binding” se puede romper la simetría de espín para los estados excitados cuando los potenciales de pares del sistema poseen una diferencia de fase.

11. El valor de la brecha superconductora no presenta un efecto de anisotropía si los parámetros de acople son iguales en las dos direcciones y no hay diferencia de fase entre los diferentes potenciales de pares. Esto se manifiesta en que la brecha superconductora es homogénea y resulta ser un promedio de los potenciales de pares locales y no locales.
12. En el modelo bidimensional se encuentra la brecha superconductora de esfera de Andreev, equivalente al que se encontraba en la aproximación de electrones cuasi-libres. Cuando usamos los parámetros de un plano de CuO_2 , obtenemos anisotropía de la brecha superconductora que corresponde a la literatura.

A. Relaciones de auto-consistencia

La definición del potencial de pares lleva consigo el cálculo de los valores esperados de los operadores, para conocer estos valores esperados es necesario resolver las ecuaciones de Bogoliubov de-Gennes y con las nuevas funciones calcular nuevamente el potencial de pares, en la práctica este proceso se calcula hasta un límite en donde el potencial de pares converge a un valor o se obtiene una ecuación usando estas dos condiciones. Las ecuaciones de auto-consistencia nos permiten obtener resultados parciales acerca de la forma del potencial de pares, así como confirmación de resultados importantes de la teoría.

La primera relación de auto-consistencia para analizar es la usada en el espacio real definida por

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_n (u_n(\mathbf{r}') \mathbf{v}_n^*(\mathbf{r})(1 - f_n) - u_n(\mathbf{r}) \mathbf{v}_n^*(\mathbf{r}')(f_n)) \quad (188)$$

siendo f_n la distribución de Fermi, cuando se ha usado la transformación de Bogoliubov, si suponemos que queda uno es aproximadamente como el del metal normal antes de la transición de fase a superconductor tenemos por el teorema de Bloch podemos escribir las funciones u_n y v_n donde el n indica la banda de energía

$$u_n(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{r}} \sum_{K_m} u_{km}(\mathbf{k}_n) e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}}$$

$$v_n(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{r}} \sum_{K_m} v_{km}(\mathbf{k}_n) e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}}$$

Al reemplazar estas transformaciones en la relación de auto-recurrencia

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sum_{K, K_m, K'_m} u_{K_m}(\mathbf{k}_n) v_{K'_m}^*(\mathbf{k}_n) \left(e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} e^{iK_m \cdot \mathbf{r}'} e^{-iK'_m \cdot \mathbf{r}} (1 - f_K) - e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})} e^{iK_m \cdot \mathbf{r}} e^{-iK'_m \cdot \mathbf{r}'} (f_K) \right).$$

De nuevo escribimos esto con el cambio de coordenadas

$$\mathbf{s} = \mathbf{r} - \mathbf{r}', \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r} + \mathbf{r}'}{2} \quad (189)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} + \frac{\mathbf{s}}{2}, \mathbf{r}' = \mathbf{R} - \frac{\mathbf{s}}{2}, \quad (190)$$

con lo cual nuestro potencial queda dado por

$$\Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R}) = V(\mathbf{s}, \mathbf{R}) \sum_{K, K_m, K'_m} \left\{ u_{K_m}(\mathbf{k}_n) v_{K'_m}^*(\mathbf{k}_n) \right. \\ \left. \left(e^{-i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{s})} e^{iK_m \cdot (\mathbf{R} - \frac{\mathbf{s}}{2})} e^{-iK'_m \cdot (\mathbf{R} + \frac{\mathbf{s}}{2})} (1 - f_K) - e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{s})} e^{iK_m \cdot (\mathbf{R} + \frac{\mathbf{s}}{2})} e^{-iK'_m \cdot (\mathbf{R} - \frac{\mathbf{s}}{2})} (f_K) \right) \right\}$$

que agrupando en dos términos de R y s

$$\Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R}) = V(\mathbf{s}, \mathbf{R}) \sum_{K, K_m, K'_m} \left\{ u_{K_m}(\mathbf{k}_n) v_{K'_m}^*(\mathbf{k}_n) e^{i(K_m - K'_m) \cdot (\mathbf{R})} \right. \quad (191)$$

$$\left. \left(e^{-i(\mathbf{K} + (\mathbf{K}_m + \mathbf{K}'_m)/2) \cdot (\mathbf{s})} (1 - f_K) - e^{i(\mathbf{K} + (\mathbf{K}_m + \mathbf{K}'_m)/2) \cdot (\mathbf{s})} (f_K) \right) \right\} \quad (192)$$

como \mathbf{K}_m y \mathbf{K}'_m son las expansiones en cada una de las series de Fourier de la red, están barriendo sobre los mismos términos, y por tanto $\mathbf{K}_m - \mathbf{K}'_m = \overline{\mathbf{K}}$, recorre sobre los mismos vectores de la red recíproca y por tanto barren sobre los mismos valores de nuestra red periódica. Es en el termino de interacción donde no se puede determinar la forma final del potencial de pares,

$$\Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R}) = V(\mathbf{s}, \mathbf{R}) \sum_{K, K_m, \overline{\mathbf{K}}} u_{K_m}(\mathbf{k}_n) v_{K_m - \overline{\mathbf{K}}}^*(\mathbf{k}_n) e^{i\overline{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{R}} \left(e^{-i(\mathbf{K} + \mathbf{K}_m + \overline{\mathbf{K}})/2 \cdot (\mathbf{s})} (1 - f_K) - e^{i(\mathbf{K} + \mathbf{K}_m + \overline{\mathbf{K}})/2 \cdot (\mathbf{s})} (f_K) \right) \quad (193)$$

La periodicidad de estas ecuaciones queda determinada por $V(\mathbf{s}, \mathbf{R})$. El origen de este potencial se basa en la interacción electrón fonón [26] pero hasta la fecha no se ha encontrado el origen de forma precisa. Cualquier caso donde este potencial de interacción sea periódico o constante que es la aproximación usual genera un potencial de pares periódico. Con lo cual tenemos finalmente que el potencial de pares es periodico con cualquiera de estos resultados donde \mathbf{r}_m es un vector de la red recíproca.

$$V(\mathbf{s}, \mathbf{R}) = V(\mathbf{s} + \mathbf{r}_m, \mathbf{R} + \mathbf{r}_m) V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V(\mathbf{r} + \mathbf{r}_m, \mathbf{r}' + \mathbf{r}_m) \quad (194)$$

Notemos ademas que las expansiones de u_n y v_n cumplen la propiedad de los metales, y por lo tanto cumplen que para cualquier vector de la red periódica recíproca \mathbf{K}_m

$$u_{km}(\mathbf{k}_n) = u_{km}(\mathbf{k}_n + \mathbf{K}_m) \quad (195)$$

$$v_{km}(\mathbf{k}_n) = v_{km}(\mathbf{k}_n + \mathbf{K}_m). \quad (196)$$

Este resultado en particular permite obtener que

$$\int d\mathbf{s} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_m)\cdot\mathbf{s}} \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R}) = \int d\mathbf{s} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_m)\cdot\mathbf{s}} V(\mathbf{s}, \mathbf{R}) \sum_{K, K'_m, \bar{\mathbf{K}}} u_{K'_m}(\mathbf{k}_n) v_{,-\bar{\mathbf{K}}}^*(\mathbf{k}_n) e^{i\bar{\mathbf{K}}\cdot\mathbf{R}} \left(e^{-i(\mathbf{K}+\mathbf{K}'_m+(\bar{\mathbf{K}})/2)\cdot(\mathbf{s})} (1-f_K) - e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{K}'_m+(\bar{\mathbf{K}})/2)\cdot(\mathbf{s})} (f_K) \right) \quad (197)$$

Redefiniendo \mathbf{k}_n como $\mathbf{k}_n - \mathbf{K}_m$ y al ser \mathbf{K}_m un vector de la red reciproca los coeficientes quedan invariantes con lo cual

$$\int d\mathbf{s} e^{-i(\mathbf{k}_m)\cdot\mathbf{s}} \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R}) = \int d\mathbf{s} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_m)\cdot\mathbf{s}} V(\mathbf{s}, \mathbf{R}) \sum_{K, K'_m, \bar{\mathbf{K}}} u_{K'_m}(\mathbf{k}_n) v_{,-\bar{\mathbf{K}}}^*(\mathbf{k}_n) e^{i\bar{\mathbf{K}}\cdot\mathbf{R}} \left(e^{-i(\mathbf{K}+\mathbf{K}'_m+(\bar{\mathbf{K}})/2)\cdot(\mathbf{s})} (1-f_K) - e^{i(\mathbf{K}+\mathbf{K}'_m+(\bar{\mathbf{K}})/2)\cdot(\mathbf{s})} (f_K) \right) \quad (198)$$

y obtenemos que

$$\int d\mathbf{s} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_m)\cdot\mathbf{s}} \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R}) = \int d\mathbf{s} e^{-i(\mathbf{k}_m)\cdot\mathbf{s}} \Delta(\mathbf{s}, \mathbf{R}) \quad (199)$$

En contraste la ecuación de auto-consistencia en el modelo Tight-Binding, están dadas en términos de puntos de red

$$\Delta_{j,n}^* = \sum_{i,m} V_{i,m,j,n} \langle c_{i,+}^\dagger c_{m,-}^\dagger \rangle \quad (200)$$

esta ecuación agrupa todos y cada uno de los términos de salto entre vecinos donde la forma del potencial $V_{i,m,j,n}$ determinara en gran medida la forma final que toma el potencial de pares. En la ecuación de recurrencia es necesario tomar una aproximación en la suma al igual que se realiza en los modelos ‘‘Tight Binding’’, será dada por el número de vecinos.

De forma general se había obtenido que el potencial de interacción de los cuatro puntos estaba dado por

$$V_{i,m,j,n} = \frac{1}{V^2} \sum_{k,k',k'',k'''} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \widehat{\Psi}_{\mathbf{k},\alpha}^*(\mathbf{r}) \widehat{\Psi}_{\mathbf{k}',\beta}^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \widehat{\Psi}_{\mathbf{k}'',\beta}(\mathbf{r}') \widehat{\Psi}_{\mathbf{k}''',\alpha}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}_m} e^{-i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{k}'''\cdot\mathbf{R}_n} \quad (201)$$

Este potencial de interacción tiene en cuenta la destrucción de dos partículas y la creación de dos partículas, las aproximaciones están relacionadas es donde se pueden crear o destruir los electrones en la red. Es de esperar que ésta interacción decaiga con la distancia, una aproximación de primeros vecinos ésta dada por las 4 posibilidades de crear y destruir electrones en la red, donde las relaciones de auto recurrencia deben tener el mismo orden en las aproximaciones, si se asume una aproximación a primeros vecinos en el potencial de pares, la misma se debe tener en la relación de auto recurrencia. En los ejemplos desarrollados en una y dos dimensiones se tiene interacciones a primeros vecinos solamente. El modelo de Hubbard[27] que es de interacción entre electrones en TB, por ejemplo la interacción de Coulomb, se obtiene que el término de cuatro interacciones se puede escribir como

$$\sum_{\alpha\beta} \sum_{i,j} V_{i,j,i,j} c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\beta}^\dagger c_{j,\beta} c_{i,\alpha} \quad (202)$$

con lo cual supondremos que las relaciones de auto-consistencia se tendrán términos equivalentes.

En el modelo unidimensional tenemos 4 potenciales de pares distintos los cuales fueron Δ_p^* , Δ_d^* , Δ^* y Δ'^* , cada uno de estos representa un tipo de potencial distinto, si escogemos que la aproximación de primeros vecinos junto con el resultado del modelo de Hubbard para interacción de Coulomb en la interacción $V_{i,j,i,j}$ obtenemos que los únicos no cero serán V_{p_i,p_i,p_i,p_i} , V_{d_i,d_i,d_i,d_i} , $V_{+p_i,+d_i,+p_i,+d_i}$ y $V_{-p_{i+1},+d_i,-p_{i+1},+d_i}$ donde el más y menos corresponde a los orbitales y el subíndice corresponde al sitio de red. con estos cuatro se generan tanto las restricciones en el Hamiltoniano y las relaciones de recurrencia, los dos primeros índices corresponden a la destrucción y los dos últimos a la creación de los electrones. Ahora aplicamos la relación de auto recurrencia con lo cual obtenemos

$$\Delta_p^* = \sum_{i,m} V_{i,m,p_i,p_i} (\langle c_{i,+}^\dagger c_{m,-}^\dagger \rangle) = V_{p_i,p_i,p_i,p_i} (\langle c_{p_i,+}^\dagger c_{p_i,-}^\dagger \rangle) \quad (203)$$

$$\Delta_d^* = \sum_{i,m} V_{i,m,d_i,d_i} (\langle c_{i,+}^\dagger c_{m,-}^\dagger \rangle) = V_{d_i,d_i,d_i,d_i} (\langle c_{d_i,+}^\dagger c_{d_i,-}^\dagger \rangle) \quad (204)$$

$$\Delta^* = \sum_{i,m} V_{i,m,p_i,d_i} (\langle c_{i,+}^\dagger c_{i,-}^\dagger \rangle) = V_{+p_i,+d_i,+p_i,+d_i} (\langle c_{p_i,+}^\dagger c_{d_i,-}^\dagger \rangle) \quad (205)$$

$$\Delta'^* = \sum_{i,m} V_{i,m,-p_{i+1},+d_i} (\langle c_{i,+}^\dagger c_{i,-}^\dagger \rangle) = V_{-p_{i+1},+d_i,-p_{i+1},+d_i} (\langle c_{p_{i+1},+}^\dagger c_{d_i,-}^\dagger \rangle) \quad (206)$$

De (201) que la información doblemente negativa o doblemente positiva son iguales con lo cual tenemos que $V_{+p_i,+d_i,+p_i,+d_i} = V_{-p_{i+1},+d_i,-p_{i+1},+d_i}$, entonces los signos y las diferencias entre los dos estarán dadas solamente por los valores esperados de los operadores.

El punto de unión entre TB y el espacio real es el espacio Bloch, es en ese momento que se aprecian las diferencias y similitudes entre ambos métodos. Para esto debemos tener en cuenta las (117) con lo

cual obtenemos que

$$c_{d,i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{d,\mathbf{k},\sigma}$$

$$c_{p,i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{p,\mathbf{k},\sigma}$$

$$\langle c_{p_i,+}^\dagger c_{d_i,-}^\dagger \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{p,\mathbf{k},+} + \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{d,\mathbf{k},-} \right\rangle = \left\langle \sum_{\mathbf{k}} c_{p,\mathbf{k},+} c_{d,-\mathbf{k},-} \right\rangle \quad (207)$$

$$\langle c_{p_{i+1},+}^\dagger c_{d_i,-}^\dagger \rangle = \left\langle \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} c_{p,\mathbf{k},+} c_{d,\mathbf{k},-} \right\rangle \quad (208)$$

B. Brecha para superconductores homogéneos

Los superconductores homogéneos poseen como espectro de energía

$$E = \sqrt{(\varepsilon(\mathbf{k}))^2 + |\Delta(\mathbf{k})|^2}, \quad (209)$$

con $\varepsilon(\mathbf{k})$ la energía del electrón libre dada por

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - E_f, \quad (210)$$

siendo E_f la energía de Fermi, esta forma de energía genera un espectro de energía con una brecha sobre la superficie de Fermi de valor Δ .

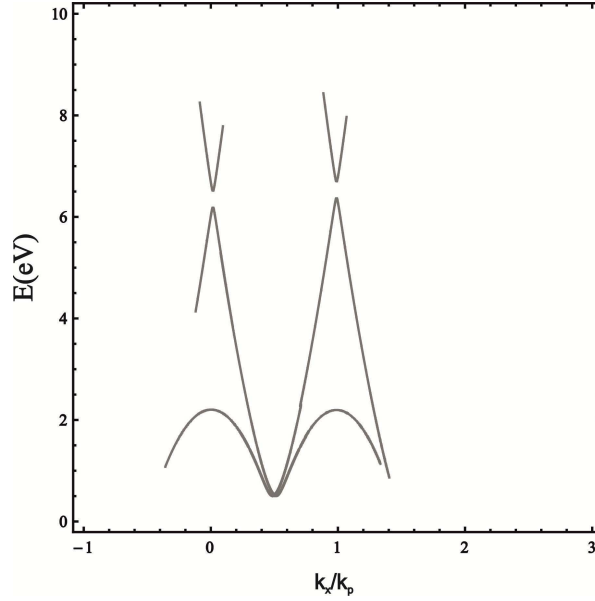


Figura 28: Espectro de energía cuando el término $V_{\mathbf{K}_p}$ no es del orden perturbativo. Se nota una región difusa en el plano de Bragg que corresponde a un modelo incorrecto.

C. Cuando el plano de Bragg afecta la superficie de Fermi

Para realizar el estudio de este caso será necesario recordar que significa el estado base del superconductor. En el modelo BCS tenemos que el estado base son pares de electrones, asociados con momento y espín opuesto. Los estados acoplados están sobre la superficie de Fermi y la energía presenta una brecha de Δ medido respecto a la energía de Fermi. En estos valores tenemos los valores de los primeros estados excitados de nuestro superconductor que son cuasi-partículas electrón hueco [11].

Pero si estamos cerca a un plano de Bragg la superficie de Fermi es deformada. Analicemos el caso del primer plano de Bragg, con un K_f de valor $\frac{|k_1|}{2}$. En este caso tenemos cuatro cruces de las parábolas, es decir, en esa condición tenemos una brecha de plano de Bragg, una brecha de cuasi-partícula “homogéneo” y posiblemente una de esfera de Andreev.

Como solo es necesario un K_p particular obtenemos que el espectro de energía tendrá la forma de la figura 28. La pregunta que debemos hacernos es, ¿existe una brecha superconductor?

Para responder la pregunta recordemos que la superficie de Fermi no presenta ningún corte con el eje k_x (ver figura 29) para este caso, es decir, realmente no tengo estados accesibles de electrón-hueco, lo que me imposibilita la creación de la cuasi-partícula. Las soluciones homogéneas no son correctas y lo que realmente cálculo es una brecha de Bragg que está cerca a la energía de Fermi. Este resultado es invariante si se añade la esfera de Andreev. Con ésto en mente nos preguntamos como serian los estados

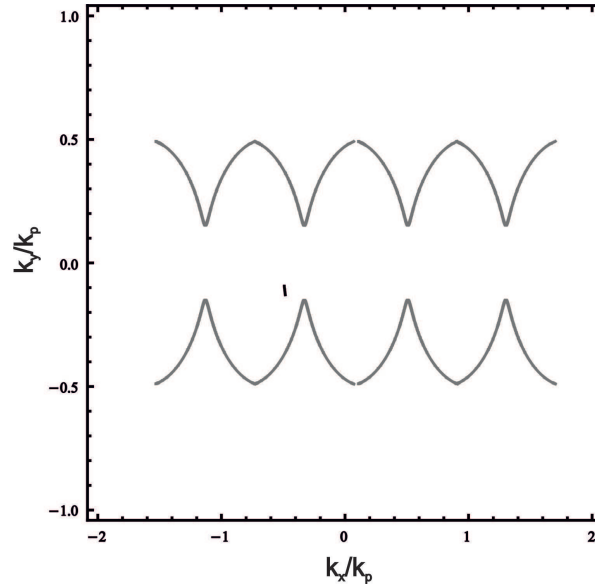


Figura 29: Superficie de Fermi cuando $K_F = \mathbf{K}_1/2$, en esta se obtiene que en el eje k_x la superficie de Fermi no posee cortes y por lo tanto no tengo forma de crear cuasi-partículas con el potencial Δ_{BCS} , siendo Δ_{BCS} la brecha sobre la superficie de Fermi de la teoría BCS.

si solo usamos los estados de electrón o solo los estados de hueco por aparte, con lo cual obtenemos la figura 30.

El relacionar las dos figuras para las bandas obtenemos que la primera banda positiva que seria la correspondiente a un partícula tipo hueco, carece de sentido. Debido a que realmente no tengo estados hueco por encima de la energía de Fermi.

Este resultado es bastante importante, el potencial de la red puede afectar los estados de superconductividad y crear direcciones donde no ocurren reflexiones de Andreev.

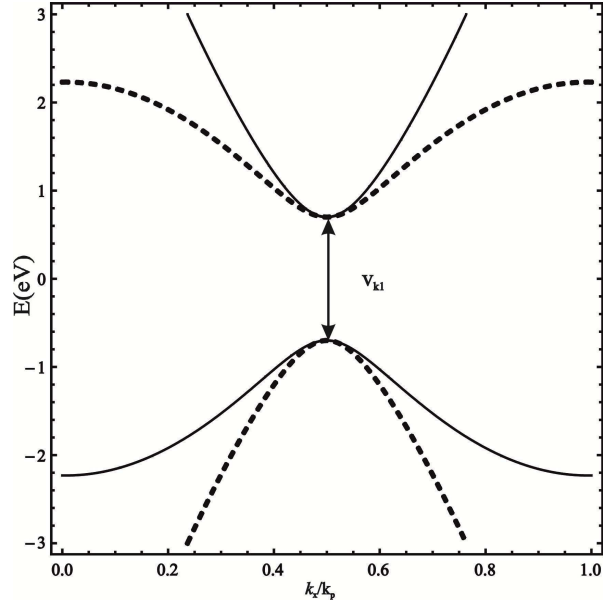


Figura 30: Solución del espectro si se usa un modelo de electrones cuasi-libres en metales, la línea continua corresponde a las soluciones tipo electrón y la línea discontinua a la de tipo hueco medido respecto a la energía de Fermi. La brecha del plano de Bragg corta las soluciones mostrando una banda extra de huecos por encima de la energía de Fermi.

D. Forma de obtener las figuras para los espectros

Para realizar las figuras del espectro de energía recordemos que estas son obtenidas al resolver los ceros de un polinomio de orden n para la energía, el orden del polinomio depende del tipo de aproximación o red usada.

En general podemos escribir el problema como

$$P[E(kx, ky, kz), n] = 0 \quad (211)$$

Vamos a construir una función dada por

$$Es[(kx, ky, kz), P[E, n]], \quad (212)$$

donde $P[E, n]$ es el polinomio dado en 211 pero donde E no tiene la dependencia implícita del vector de onda (kx, ky, kz) , si no es una variable mas de la función. La dependencia explícita del vector de onda esta en los coeficientes del polinomio. Con esto sabemos que $Es[(kx, ky, kz), P[E, n]] = k$ corresponde a superficies de nivel de la función y en especial al superficie de nivel $k=0$, es el espectro de energía. El Hecho radica que la búsqueda de la superficie de nivel 0 estamos buscando numéricamente los valores

de E que satisfagan 211.

La ventaja que presenta este método, es cuando 211 no posee una solución analítica con lo cual podemos obtener el espectro en las regiones de interés y poder extender el análisis.

E. Coeficientes de la ecuación para obtener el espectro de energía

Recordando que el espectro esta dado por la ecuación

$$E^6 + A_4E^4 \pm A_3E^3 + A_2E^2 \pm A_1E + A_0 \quad (213)$$

escribimos los coeficientes sin ningún tipo de aproximación. En la escritura se tendrá en cuenta un orden especial que debido a la naturaleza del determinante indicara si los coeficiente tienen un tipo de error. El principio es que los productos de las componentes x y y deben contener simetría lo cual es facilmente verificable.

$$A_4 = -t_d^2 - 2t_{px}^2 - 2t_{-x}t_{+x} - 2t_{-y}t_{+y} - |\Delta_d|^2 - |\Delta_{px}|^2 - |\Delta_{py}|^2 - |\Delta_{-x}|^2 - |\Delta_{+x}|^2 - |\Delta_{-y}|^2 + |\Delta_{+y}|^2$$

$$\begin{aligned} A_3 = & 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{+x} \Delta_{-x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{-x} \Delta_{+x}^*) + t_d |\Delta_{-x}|^2 - t_d |\Delta_{+x}|^2 + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{-x} \Delta_{+x}^*) \\ & - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{+x} \Delta_{-x}^*) - t_{px} |\Delta_{-x}|^2 + t_{px} |\Delta_{+x}|^2 + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{+y} \Delta_{-y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{-y} \Delta_{+y}^*) + t_d |\Delta_{-y}|^2 \\ & - t_d |\Delta_{+y}|^2 + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{-y} \Delta_{+y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{+y} \Delta_{-y}^*) - t_{px} |\Delta_{-y}|^2 + t_{px} |\Delta_{+y}|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_2 = & t_{px}^4 + 2t_d^2 t_{px}^2 + t_{-x}^2 t_{+x}^2 + t_{-y}^2 t_{+y}^2 + 2t_{px}^2 t_{-x} t_{+x} + 2t_{px}^2 t_{-y} t_{+y} + 2|\Delta_d|^2 t_{px}^2 + t_d^2 |\Delta_{px}|^2 + |\Delta_{px}|^2 t_{px}^2 \\ & + t_d^2 |\Delta_{py}|^2 + t_{px}^2 |\Delta_{py}|^2 + t_{px}^2 |\Delta_{-x}|^2 + t_{px}^2 |\Delta_{+x}|^2 + t_{px}^2 |\Delta_{-y}|^2 + t_{px}^2 |\Delta_{+y}|^2 + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{-x} t_{+x} \Delta_{-x}^*) \\ & + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{-y} t_{+y} \Delta_{-y}^*) - 2t_d t_{px} t_{-x} t_{+x} - 2t_d t_{px} t_{-y} t_{+y} + 2t_{-x} t_{-y} t_{+x} t_{+y} - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px} t_{-x} \Delta_{+x}^*) \\ & - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px} t_{+x} \Delta_{-x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{-x} t_{+x} \Delta_{px}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_d t_{-x} \Delta_{+x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_d t_{+x} \Delta_{-x}^*) \\ & + t_d t_{px} |\Delta_{-x}|^2 + t_d t_{px} |\Delta_{+x}|^2 + 2t_{-x} t_{+x} |\Delta_{py}|^2 + 2t_{-y} t_{+y} |\Delta_{px}|^2 + t_d t_{px} |\Delta_{+y}|^2 + t_d t_{px} |\Delta_{-y}|^2 \\ & - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px} t_{-y} \Delta_{+y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px} t_{+y} \Delta_{-y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{+y} t_{-y} \Delta_{py}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_d t_{-y} \Delta_{+y}^*) \\ & - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_d t_{+y} \Delta_{-y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{-x} t_{-y} t_{+x} \Delta_{+y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{+x} t_{+y} t_{-x} \Delta_{-y}^*) + t_{-y} t_{+y} |\Delta_{-x}|^2 \\ & + t_{-y} t_{+y} |\Delta_{+x}|^2 + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{-x} t_{+x} t_{+y} \Delta_{-y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{+x} t_{-x} t_{-y} \Delta_{+y}^*) + t_{-x} t_{+x} |\Delta_{-y}|^2 + t_{-x} t_{+x} |\Delta_{+y}|^2 \\ & + |\Delta_d|^2 |\Delta_{px}|^2 + |\Delta_d|^2 |\Delta_{py}|^2 + |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{py}|^2 - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d \Delta_{px} \Delta_{-x}^* \Delta_{+x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d \Delta_{py} \Delta_{+y}^* \Delta_{-y}^*) \\ & + |\Delta_{py}|^2 |\Delta_{-x}|^2 + |\Delta_{py}|^2 |\Delta_{+x}|^2 + |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{+y}|^2 + |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{-y}|^2 + |\Delta_{-x}|^2 |\Delta_{+x}|^2 + |\Delta_{+y}|^2 |\Delta_{-y}|^2 \\ & + |\Delta_{-x}|^2 |\Delta_{+y}|^2 + |\Delta_{+x}|^2 |\Delta_{-y}|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_1 = & t_{px}^3 |\Delta_{-x}|^2 - t_{px}^3 |\Delta_{+x}|^2 + t_{px}^3 |\Delta_{-y}|^2 - t_{px}^3 |\Delta_{+y}|^2 + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px}^2 t_{-x} \Delta_{+x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px}^2 t_{+x} \Delta_{-x}^*) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px}^2 t_{-y} \Delta_{+y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px}^2 t_{+y} \Delta_{-y}^*) - t_d t_{px}^2 |\Delta_{-x}|^2 + t_d t_{px}^2 |\Delta_{+x}|^2 - t_d t_{px}^2 |\Delta_{-y}|^2 \\
& + t_d t_{px}^2 |\Delta_{+y}|^2 - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{px}^2 t_{-x} \Delta_{+x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{px}^2 t_{+x} \Delta_{-x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{px}^2 t_{-y} \Delta_{+y}^*) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{px}^2 t_{+y} \Delta_{-y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{-x} t_{-y} t_{+x} \Delta_{+y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{-x} t_{+y} t_{+x} \Delta_{-y}^*) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{-y} t_{-x} t_{+y} \Delta_{+x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{-y} t_{+x} t_{+y} \Delta_{-x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{-x} t_{-y} t_{+y} \Delta_{+x}^*) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{+x} t_{-y} t_{+y} \Delta_{-x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{-y} t_{-x} t_{+x} \Delta_{+y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{+y} t_{-x} t_{+x} \Delta_{-y}^*) \\
& - 4 \operatorname{Re}(\Delta_{-x} t_{px} t_{-y} t_{+x} \Delta_{+y}^*) + 4 \operatorname{Re}(\Delta_{+x} t_{px} t_{+y} t_{-x} \Delta_{-y}^*) + 2 t_{px} t_{-y} t_{+y} |\Delta_{-x}|^2 \\
& - 2 t_{px} t_{-y} t_{+y} |\Delta_{+x}|^2 + 2 t_{px} t_{-x} t_{+x} |\Delta_{+y}|^2 - 2 t_{px} t_{-x} t_{+x} |\Delta_{-y}|^2 + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d |\Delta_{py}|^2 t_{-x} \Delta_{+x}^*) \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d |\Delta_{py}|^2 t_{+x} \Delta_{-x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d |\Delta_{px}|^2 t_{-y} \Delta_{+y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d |\Delta_{px}|^2 t_{+y} \Delta_{-y}^*) \\
& - t_d |\Delta_{py}|^2 |\Delta_{-x}|^2 + t_d |\Delta_{py}|^2 |\Delta_{+x}|^2 - t_d |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{-y}|^2 + t_d |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{+y}|^2 + t_{px} |\Delta_{py}|^2 |\Delta_{-x}|^2 \\
& - t_{px} |\Delta_{py}|^2 |\Delta_{+x}|^2 + t_{px} |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{-y}|^2 - t_{px} |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{+y}|^2 - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} |\Delta_{py}|^2 t_{-x} \Delta_{+x}^*) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} |\Delta_{py}|^2 t_{+x} \Delta_{-x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} |\Delta_{px}|^2 t_{-y} \Delta_{+y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} |\Delta_{px}|^2 t_{+y} \Delta_{-y}^*) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{+x} \Delta_{-x}^* \Delta_{-y} \Delta_{+y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{-y} t_{+y} \Delta_{-x}^* \Delta_{+x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{+y} t_{-x} \Delta_{-y}^* \Delta_{+x}^*) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{+y} t_{-y} \Delta_{-x}^* \Delta_{+x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{+y} \Delta_{-y}^* \Delta_{-x} \Delta_{+x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} \Delta_{-x} t_{+x} \Delta_{-y}^* \Delta_{+y}^*) \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} \Delta_{+x} t_{-y} \Delta_{-x}^* \Delta_{+y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} \Delta_{+x} t_{-x} \Delta_{-y}^* \Delta_{+y}^*)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_0 = & 2t_d t_{px}^3 t_{-x} t_{+x} + 2t_d t_{px}^3 t_{-y} t_{+y} - t_{px}^2 t_{-x}^2 t_{+x}^2 - t_{px}^2 t_{-y}^2 t_{+y}^2 - |\Delta_d|^2 t_{px}^4 - |\Delta_{px}|^2 t_d^2 t_{px}^2 - |\Delta_{py}|^2 t_d^2 t_{px}^2 \\
& - t_{-x}^2 t_{+x}^2 |\Delta_{py}|^2 - t_{-y}^2 t_{+y}^2 |\Delta_{px}|^2 - 2 \operatorname{Re}(t_{px}^2 t_{+x}^2 \Delta_{-x} \Delta_{-x}^*) - 2 \operatorname{Re}(t_{px}^2 t_{+y}^2 \Delta_{-y} \Delta_{-y}^*) - t_d^2 t_{px}^4 \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px}^3 t_{-x} \Delta_{+x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px}^3 t_{+x} \Delta_{-x}^*) - t_d t_{px}^3 |\Delta_{-x}|^2 - t_d t_{px}^3 |\Delta_{+x}|^2 \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px}^3 t_{-y} \Delta_{+y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px}^3 t_{+y} \Delta_{-y}^*) - t_d t_{px}^3 |\Delta_{+y}|^2 - t_d t_{px}^3 |\Delta_{-y}|^2 \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px}^2 t_{-x} t_{+x} \Delta_{+x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_d t_{px}^2 t_{-x} \Delta_{+x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_d t_{px}^2 t_{+x} \Delta_{-x}^*) \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px}^2 t_{-y} t_{+y} \Delta_{+y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_d t_{px}^2 t_{-y} \Delta_{+y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_d t_{px}^2 t_{+y} \Delta_{-y}^*) \\
& + t_{px}^2 t_{-y} t_{+y} |\Delta_{-x}|^2 + t_{px}^2 t_{-y} t_{+y} |\Delta_{+x}|^2 + t_{px}^2 t_{-x} t_{+x} |\Delta_{+y}|^2 + t_{px}^2 t_{-x} t_{+x} |\Delta_{-y}|^2 \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{-x} t_{px}^2 t_{-y} t_{+x} \Delta_{+y}^*) - 2 \operatorname{Re}(t_{px}^2 t_{+x} t_{+y} \Delta_{-x} \Delta_{-y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{-y} t_{px}^2 t_{+x} t_{+y} \Delta_{-x}^*) \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{+x} t_{px}^2 t_{-x} t_{+y} \Delta_{-y}^*) - t_{px}^2 |\Delta_d|^2 |\Delta_{px}|^2 - t_{px}^2 |\Delta_d|^2 |\Delta_{py}|^2 - t_d^2 |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{py}|^2 \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d \Delta_{px} t_{px}^2 \Delta_{-x}^* \Delta_{+x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d \Delta_{py} t_{px}^2 \Delta_{+y}^* \Delta_{-y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{-x} t_{+x}^2 |\Delta_{py}|^2 \Delta_{-x}^*) \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{-y} t_{+y}^2 |\Delta_{px}|^2 \Delta_{-y}^*) - t_{px}^2 |\Delta_{-x}|^2 |\Delta_{+x}|^2 - t_{px}^2 |\Delta_{-x}|^2 |\Delta_{+y}|^2 - t_{px}^2 |\Delta_{-y}|^2 |\Delta_{+x}|^2 \\
& - t_{px}^2 |\Delta_{-y}|^2 |\Delta_{+y}|^2 - 2t_{px}^2 t_{-x} t_{-y} t_{+x} t_{+y} + 2t_d t_{px} t_{-x} t_{+x} |\Delta_{py}|^2 + 2t_d t_{px} t_{+y} t_{-y} |\Delta_{px}|^2 \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{px} t_{-x} t_{-y} t_{+x} \Delta_{+y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{px} t_{-x} t_{-y} t_{+y} \Delta_{+x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{px} t_{-x} t_{+x} t_{+y} \Delta_{-y}^*) \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{px} t_{-y} t_{+x} t_{+y} \Delta_{-x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{px} t_{-y} t_{-x} t_{+y} \Delta_{+x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{px} t_{-y} t_{+x} t_{-x} \Delta_{+y}^*) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{px} t_{-y} t_{+y} t_{+x} \Delta_{-x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_{px} t_{-x} t_{+y} t_{+x} \Delta_{-y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_{-x} t_{-y} t_{+x} t_{+y} \Delta_{+y}^*) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d |\Delta_{py}|^2 t_{px} t_{-x} \Delta_{+x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px} t_{+x} |\Delta_{py}|^2 \Delta_{-x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{-x} t_{+x} \Delta_{+x}^* |\Delta_{py}|^2) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_d t_{-x} \Delta_{+x}^* |\Delta_{py}|^2) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} t_d t_{+x} \Delta_{-x}^* |\Delta_{py}|^2) - t_d t_{px} |\Delta_{py}|^2 |\Delta_{-x}|^2 - t_d t_{px} |\Delta_{py}|^2 |\Delta_{+x}|^2 \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d |\Delta_{px}|^2 t_{px} t_{-y} \Delta_{+y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{px} t_{+y} |\Delta_{px}|^2 \Delta_{-y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_d t_{-y} t_{+y} \Delta_{+y}^* |\Delta_{px}|^2) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_d t_{-y} \Delta_{+y}^* |\Delta_{px}|^2) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} t_d t_{+y} \Delta_{-y}^* |\Delta_{px}|^2) - t_d t_{px} |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{+y}|^2 - t_d t_{px} |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{-y}|^2 \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{-y} t_{px} t_{+x} \Delta_{-x}^* \Delta_{+y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{-y} t_{px} t_{+y} \Delta_{-x}^* \Delta_{+x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{+y} t_{px} t_{-x} \Delta_{-y}^* \Delta_{+x}^*) \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{+y} t_{px} t_{-y} \Delta_{-x}^* \Delta_{+x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} \Delta_{-x} t_{px} t_{+y} \Delta_{-y}^* \Delta_{+x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} \Delta_{-x} t_{px} t_{+x} \Delta_{-y}^* \Delta_{+y}^*) \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} \Delta_{+x} t_{px} t_{-y} \Delta_{-x}^* \Delta_{+y}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{py} \Delta_{+x} t_{px} t_{-x} \Delta_{-y}^* \Delta_{+y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{py} t_{-x} t_{+x} \Delta_{-y}^* \Delta_{+y}^*) \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{py} t_{-x} t_{+y} \Delta_{-y}^* \Delta_{+x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{py} t_{-y} t_{+x} \Delta_{-x}^* \Delta_{+y}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{py} t_{-y} t_{+y} \Delta_{-x}^* \Delta_{+x}^*) \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{-y} t_{+x} t_{+y} \Delta_{+y}^* \Delta_{-x}^*) - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{+y} t_{-x} t_{-y} \Delta_{+y}^* \Delta_{+x}^*) - |\Delta_d|^2 |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{py}|^2 \\
& + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d \Delta_{px} |\Delta_{py}|^2 \Delta_{-x}^* \Delta_{+x}^*) + 2 \operatorname{Re}(\Delta_d \Delta_{py} |\Delta_{px}|^2 \Delta_{-y}^* \Delta_{+y}^*) - |\Delta_{py}|^2 |\Delta_{-x}|^2 |\Delta_{+x}|^2 \\
& - 2 \operatorname{Re}(\Delta_{px} \Delta_{-y} \Delta_{+y} \Delta_{+y}^* \Delta_{-x}^* \Delta_{+x}^*) - |\Delta_{px}|^2 |\Delta_{-y}|^2 |\Delta_{+y}|^2
\end{aligned}$$

Referencias

- [1] OTFRIED MADELUNG, *Introduction to Solid-State Theory*, springer, 1978.
- [2] CHARLES KITTEL, *Introduction to solid state physics*, seventh edition , Wiley 1978.
- [3] NEIL W. ASHCROFT, y N. DAVID MERMIN, *Solid State Physics*, Saunders College, 1976.
- [4] SHIGEJI FUJITA y S. GODOY, *Quantum Statistical Theory Of Superconductivity*, Plenum Publishers, 1996.
- [5] Y. TSUBOKURA, M. MIYAMOTO, K. IKEDA, T. NAKAMURA y T. TAKAHASHI , *Temperature dependence of infrared spectra of (ET)₄Hg₃I₈ crystals; H₈- and D₈-ET derivatives*, *Synthetic Metals* **70**, 913 (1997).
- [6] STEPHAN HAAS y KAZUMI MAKI, *Anisotropic s-wave superconductivity in MgB₂*, *Phys. Rev. B* **65**, 020502 (2001).
- [7] R. GONCZAREK, L. JACAK, M. KRZYZOSIAKA y A. GONCZAREK, *Competition mechanism between singlet and triplet superconductivity in tight-binding model with anisotropic attractive potential*, *European Physical Journal B* **49** , 171-186(2006).
- [8] C. C. TSUEI y J. R. KIRTLEY, *Pairing symmetry in cuprate superconductors*, *Rev. Mod. Phys.* , **72**, 969 (2000).
- [9] YONG-JIHN KIM, *Pairing in the Bogoliubov-de Gennes equations*. cond-mat/9701102.
- [10] K. YOSHIDA, Y. MAENO, S. NISHIZAKI y T. FUJITA, *Anisotropic superconductivity of Sr₂RuO₄*, *Physica C:Superconductivity* **263**, 519 (1996).
- [11] P. G. DE GENNES, *Superconductivity Of Metals And Alloys*, Westview Press, 1966.
- [12] ADAM WASSERMAN, *Efecto de la red cristalina sobre el espectro de energía de las cuasipartículas en un superconductor*, tesis de grado Universidad Nacional de Colombia.
- [13] ENRICO PERFETTO, GIANLUCA STEFANUCCI y MICHELE CINI, *Equilibrium and time-dependent Josephson current in one-dimensional superconducting junctions*, *Physical Review B*, **80**, 205408 (2009).
- [14] MITAKE MIYAZAKI, KEITA KISHIGI y YASUMASA HASEGAWA, *Superconductivity of Quasi-Two-Dimensional Tight-Binding Electrons in a Strong Magnetic Field*, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **68**, 2344-2350 (1999).

- [15] GUI-BIN LIU, WEN-YU SHAN, YUGUI YAO, WANG YAO y DI XIAO, *Three-band tight-binding model for monolayers of group-VIB transition metal dichalcogenides*, *Physical Review B*, **88**, 085433 (2013).
- [16] PEKKA KOSKINEN y VILLE MÄKINEN, *Density-functional tight-binding for beginners*, *Computational Materials Science*, **47**, 237(2009).
- [17] H. PLEHN, O. WACKER y KÜMMEL, *Physical Review B*, *Electronic structure of superconducting multilayers*, **49**, 12140 (1994).
- [18] HELMUT ESCHRIG y KLAUS KOEPERNIK, *Tight-binding models for the iron-based superconductors*. *Physical Review B*, **80**, 104503 (2009).
- [19] R. GONCZAREK, M. G LADYSIEWICZ y M. MULAK, *On possible formalism of anisotropic Fermi liquid and BCS-TYPE superconductivity*. *Int. J. Mod. Phys. B*, **15**, 491 (2001).
- [20] J. E. HIRSCH, *A new basis set for the description of electrons in superconductors*. cond-mat/1001.1343v1.
- [21] R. B. LAUGHLIN, *Hartree-Fock Computation of the High-Tc Cuprate Phase Diagram*. cond-mat/1306.5359v1.
- [22] TODOR MIHAYLOV MISHONOV, *On the theory of high-temperature superconductivity: from electronic structure to fluctuations properties and electrodynamic behavior*, Department of Theoretical Physics, St. Clement of Ohrid University of Sophia.
- [23] CHR. BRUDER, *Andreev scattering in anisotropic superconductors*, *Phys. Rev. B*, **41**, 4017 (1990).
- [24] JEAN-PAUL BLAIZOT y GEORGES RIPKA, *Quantum theory and finite systems*, Cambridge (1986).
- [25] YOSHIO KURAMOTO y YOSHIO KITAOKA, *Dynamics of Heavy Electrons* monografía. Oxford University Press (1999).
- [26] MIODRAG L. KULICD., *Interplay of electron-phonon interaction and strong correlations: the possible way to high-temperature superconductivity*, *Physics Reports*, textbf338, 1-264 (2000).
- [27] QIAN XIE y PENG CHEN, *Semiempirical tight-binding interatomic potentials based on the Hubbard model*. *Physical Review B*, **56**, 5235 (1997).