

DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID



# **Desarrollos en teorías de muchos cuerpos para sistemas superconductores finitos**

Memoria de Tesis Doctoral presentada ante la Facultad de Ciencias,  
Sección de Ciencias Físicas, de la Universidad Autónoma de Madrid,  
por **Miguel Ángel Fernández López.**

Trabajo dirigido por el **Dr. D. José Luis Egido de los Ríos.**  
Catedrático del Departamento de Física Teórica  
de la Universidad Autónoma de Madrid,

Madrid, Mayo de 2006.



*A Gloria, Tania y Sonia.*

*A mis padres.*





## PUBLICACIONES

Parte del contenido de esta tesis está basado en las siguientes publicaciones:

- *Generalized BCS Ansatz for Pairing Correlations in Superconducting Grains.*  
M.A. Fernández and J.L. Egido. Phys. Rev. B 68 (18) N. 184505 (2003).
- *Pairing correlations in the strong fluctuation regime.*  
M.A. Fernández and J.L. Egido. Int. J. of Mod. Phys. E 13 (1): 235-238 (2004).
- *Pairing correlations in finite systems: from the weak to the strong fluctuations regime.*  
M.A. Fernández and J.L. Egido. Eur. Phys. J. B 48 (3) 305-317 (2005).
- *Pairing Correlations in Mesoscopic Physics.*  
M.A. Fernández and J.L. Egido. Phys. Scrip. C (*in press*).



# AGRADECIMIENTOS

Desconozco los motivos a través de los cuales los destinos de las personas quedan más o menos ligados. El mio propio ha quedado ligado al de algunas personas a las que ahora tengo la oportunidad de agradecer profundamente su presencia.

La dirección y el consejo de J. L. Egido a lo largo de estos años años han hecho posible esta tesis. No menos importante para mi han sido su confianza y su infinita paciencia para conmigo, y especialmente, todas las conversaciones que hemos mantenido y que no han tenido una sólo palabra de física.

Quiero agradecer a mis padres con todas mis fuerzas el haber hecho realidad mi dedicación al estudio de la física, por su amor, y su continuo apoyo en todas las áreas de mi vida.

Por último, mi más sincero agradecimiento a las personas que han estado a mi lado en este camino, por ayudarme, animarme y demostrarme su amistad y cariño: Tomás Rodríguez, Óscar Paz, Eduardo Anglada, Javier Menéndez, Elsa Prada, Pablo San José, Sara Pérez, Carlos Hoyos, Alfonso Hoyos, Guillermo Román, Juan F. Sierra, Juan F. García, Ignacio Plans, Luis Miguel Robledo, Juan José Riquelme, Rubén Pérez, José Marín, Alejandro García, Daniel López, Sergio Montero, Sergio Montañez, África Periañez, Juan Zazo, David Marcos y Trung Tuan.



# ÍNDICE GENERAL

---

## I INTRODUCCIÓN

---

<b>1</b>	<b>INTRODUCCIÓN Y ESTRUCTURA DE LA TESIS</b>	<b>3</b>
	1.1 Granos superconductores . . . . .	3
	1.2 Motivaciones y estructura de la tesis . . . . .	5

---

## II EXPERIMENTOS

---

<b>2</b>	<b>DETALLES EXPERIMENTALES</b>	<b>11</b>
----------	--------------------------------	-----------

---

## III TEORÍA

---

<b>3</b>	<b>NATURALEZA DE LAS CORRELACIONES DE APAREAMIENTO</b>	<b>17</b>
	3.1 Introducción . . . . .	17
	3.2 Descripción canónica de la mezcla de pares . . . . .	18
	3.3 Sobre la ruptura de la simetría <i>gauge</i> . . . . .	19
	3.4 Teorías con el número fijo de partículas . . . . .	20
<b>4</b>	<b>APROXIMACIÓN GENERALIZADA DE CAMPO MEDIO. TEORÍA BCS.</b>	<b>23</b>
	4.1 Introducción . . . . .	23
	4.2 El Modelo . . . . .	23

---

4.3 El <i>Ansatz</i> variacional BCS . . . . .	.24
4.3.1. Las ecuaciones BCS . . . . .	25
4.3.2. Ecuaciones BCS en para el sistema impar . . . . .	27
4.4 Discusión cualitativa . . . . .	.28
4.5 Solución numérica . . . . .	.29
<b>5 SUPERCONDUCTIVIDAD EN EL SISTEMA CANÓNICO. TEORÍA PROYECTADA.</b>	<b>31</b>
5.1 Introducción . . . . .	.31
5.2 El método BCS proyectado . . . . .	.32
5.3 El modelo . . . . .	.32
5.4 La teoría PBCS . . . . .	.33
5.5 Integrales de residuo. . . . .	.34
5.6 La energía proyectada . . . . .	.36
5.7 Ecuaciones variacionales. . . . .	.37
<b>6 LA SOLUCIÓN EXACTA DE RICHARDSON</b>	<b>39</b>
6.1 Introducción . . . . .	.39
6.2 El método de Richardson. . . . .	.39
<b>7 EL MÉTODO DE LA COORDENADA GENERADORA</b>	<b>43</b>
7.1 Introducción . . . . .	.43
7.2 El <i>Ansatz</i> MCG. Ecuación de Hill-Wheeler . . . . .	.44
7.3 Funciones colectivas . . . . .	.48
7.4 Valores esperados . . . . .	.49
7.5 Resolución numérica de la ecuación de Hill-Wheeler . . . . .	.50
<b>8 APLICACIÓN DEL MÉTODO DE LA COORDENADA GENERADORA EN GRANOS SUPERCONDUCTORES</b>	<b>53</b>
8.1 Introducción . . . . .	.53
8.2 El <i>Ansatz</i> MCG aplicado a los granos superconductores. Aproximaciones MCGPAV y MCGVAP . . . . .	.53
8.3 Solapes de la norma y del hamiltoniano en los métodos MCGPAV y MCGVAP	55
8.4 Elección de la coordenada generadora . . . . .	.56

## IV CORRELACIONES DE APAREAMIENTO EN SISTEMAS FINITOS

---

### 9 CORRELACIONES DE APAREAMIENTO EN GRANOS SUPERCONDUCTORES. HAMILTONIANO REDUCIDO DE APAREAMIENTO. 61

9.1	Introducción . . . . .	.61
9.2	El modelo . . . . .	.64
9.3	Resultados preliminares: elección $\xi = \Delta$ . . . . .	.64
9.3.1.	Energías de condensación . . . . .	65
9.3.2.	Estructura de las funciones de onda: correladores . . . . .	68
9.3.3.	La dependencia en la paridad de número: el parámetro de Mateev-Larkin . . . . .	71
9.3.4.	Funciones de onda colectivas . . . . .	72
9.3.5.	Conclusiones . . . . .	74
9.4	Resultados globales . . . . .	.74
9.4.1.	Estudio de la coordenada generadora . . . . .	75
9.5	Detalles a la solución numérica de ecuación de Hill-Wheeler . . . . .	.79
9.5.1.	Aplicaciones a los granos superconductores . . . . .	82
9.5.2.	Energías de condensación . . . . .	83
9.5.3.	Correlaciones de apareamiento . . . . .	83
9.5.4.	Funciones de onda colectivas . . . . .	86
9.6	Conclusiones . . . . .	.89

### 10 CORRELACIONES DE APAREAMIENTO. HAMILTONIANO GENERALIZADO DE APAREAMIENTO 91

10.1	Introducción . . . . .	.91
10.2	Los modelos de Richardson-Gaudin . . . . .	.92
10.2.1.	La solución exacta de Richardson del modelo de apareamiento . . . . .	93
10.2.2.	El modelo de Gaudin . . . . .	95
10.2.3.	Integrabilidad del Hamiltoniano de apareamiento . . . . .	97
10.2.4.	Los modelos de Richardson-Gaudin generalizados . . . . .	98
10.3	Elección del Hamiltoniano Generalizado de apareamiento . . . . .	100
10.4	La teoría BCS en el modelo generalizado de apareamiento . . . . .	102
10.5	La teoría proyectada en el modelo generalizado de apareamiento . . . . .	103
10.6	El método de la coordenada generadora en el modelo de apareamiento generalizado . . . . .	104

### 11 APLICACIONES DEL MCG EN LOS MODELOS DE RICHARDSON-GAUDIN 107

11.1	Introducción . . . . .	107
11.2	El modelo . . . . .	107
11.3	Hamiltoniano con solución exacta . . . . .	108
11.3.1.	Las parametrizaciones $\eta_k$ . . . . .	109

11.3.2. Elección de la coordenada generadora . . . . .	109
11.3.3. Detalles de los cálculos con el MCG . . . . .	110
11.3.4. Modelo racional ( $\gamma = 0$ ) . . . . .	110
11.3.5. Modelo trigonométrico ( $\gamma = 1$ ) . . . . .	120
11.3.6. Modelo hiperbólico ( $\gamma = -i$ ) . . . . .	131
11.4 Hamiltoniano sin solución exacta . . . . .	139
11.5 Conclusiones . . . . .	142

## **12 CONCLUSIONES GENERALES** 145

---

## **V APÉNDICES**

---

### **A LÍMITES ANALÍTICOS DEL MODELO BCS** 149

A.1 $d \rightarrow 0$ y expansión Euler-MacLaurin . . . . .	149
A.2 $d$ cerca de $d_c$ y la expansión para $\Delta$ pequeño . . . . .	150

### **B DETALLES DEL MÉTODO PBCS** 153

B.1 Evaluación de los valores esperados . . . . .	153
B.2 Variación de las integrales de Residuo . . . . .	155
B.3 Las ecuaciones variacionales. . . . .	156
B.4 Sistema con un número de partículas impar. . . . .	157
B.5 Solución numérica de las ecuaciones variacionales . . . . .	158
B.6 Cálculo de las integrales de Residuo. . . . .	159

### **C CALCULANDO INTEGRALES DE RESIDUO USANDO LA TRANSFORMACIÓN RÁPIDA DE FOURIER (FFT)** 161

### **D LAS INTEGRALES DE RESIDUO GENERALIZADAS. SOLAPES DE LA NORMA Y EL HAMILTONIANO EN EL MCG** 165

### **E OBTENCIÓN DE LAS ECUACIONES DE RICHARDSON** 169

E.1 El principio de Pauli. . . . .	169
E.2 La solución de la ecuación de Schrödinger . . . . .	170
E.3 Implementación numérica . . . . .	172



<b>F</b>	<b>LIGADURAS EN LA TEORÍA BCS Y PBCS</b>	175
	F.1 Ligaduras en la teoría BCS . . . . .	175
	F.2 Ligadura $\Delta N^2$ en el método proyectado. . . . .	177
<b>G</b>	<b>CÁLCULO DE LOS CORRELADORES <math>C_k^2</math></b>	179
	G.1 Cálculo en la teoría generalizada BCS . . . . .	179
	G.2 Cálculo en la teoría proyectada PBCS . . . . .	180
	G.3 Cálculo en la solución exacta de Richardson . . . . .	181
	G.4 Cálculo en el método de la coordenada generadora MCG. . . . .	181
<b>H</b>	<b>LA TEORÍA BCS EN LOS MODELOS DE RICHARDSON-GAUDIN</b>	183
	H.1 Ecuaciones variacionales BCS . . . . .	183
	H.1.1. Solución numérica de las ecuaciones variacionales BCS . . . . .	186
<b>I</b>	<b>EL MÉTODO PROYECTADO EN LOS MODELOS DE RICHARDSON-GAUDIN</b>	187
	I.1 Ecuaciones variacionales PBCS. . . . .	187
	I.2 Solución numérica a las ecuaciones variacionales PBCS . . . . .	190
	I.3 Cálculo de los campos $\hat{\epsilon}_k, \Lambda_k, \Gamma_k, \Delta_k$ . . . . .	190
<b>J</b>	<b>EL MÉTODO DE LA COORDENADA GENERADORA EN LOS MODELOS DE RICHARDSON-GAUDIN</b>	193
	J.1 Solapes de la norma y el Hamiltoniano . . . . .	193





# **INTRODUCCIÓN**

---



## INTRODUCCIÓN Y ESTRUCTURA DE LA TESIS

### 1.1 Granos superconductores

El descubrimiento de la superconductividad por parte de Kammerlingh Onnes en 1911 lo convirtió en uno de los fenómenos más estudiados en la física de la materia condensada. La explicación microscópica del fenómeno por parte de Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) [BCS57] es uno de los hitos más importantes en la física del siglo XX. A pesar de los años transcurridos, los avances actuales en las técnicas experimentales de fabricación y técnicas de medida continúan brindando nuevos aspectos de la superconductividad, que a su vez requieren nuevos desarrollos o extensiones de los conocimientos teóricos.

El estudio de los efectos superconductores en los granos metálicos ultrapequeños ha sido recientemente uno de los campos donde el desarrollo teórico de varios aspectos de la superconductividad ha sido fuertemente impulsado.

En la mitad de los años 90, Ralph, Black y Tinkham (RBT) fueron capaces por vez primera de medir el espectro discreto de excitación de un grano metálico individual usando una técnica llamada espectroscopía de tuneleo monoeléctrico (*single electron tunneling spectroscopy*). Conectando un grano metálico individual a través de barreras túnel de óxido a dos conexiones, RBT pudieron construir un transistor monoeléctrico el cual tiene el grano metálico insertado en su interior. A partir de este dispositivo mostraron que podía obtenerse un espectro de excitación discreto a través del análisis de la conductancia [RBT95, BRT96, RBT96, RBT97].

Este desarrollo abrió una nueva frontera en el estudio de las correlaciones en los sistemas metálicos, pues la capacidad de resolver los niveles discretos de energía permite el estudio de la naturaleza de las correlaciones entre electrones con un detalles sin precedentes. La técnica creada por RBT ha sido usada para probar correlaciones de apareamiento superconductoras en granos de Aluminio [BRT96, RBT97], excitaciones en régimen de no equilibrio [AWA<sup>+</sup>97, AA97, Aga99] e interacciones de espín-órbita [RBT95, RBT96, SGR<sup>+</sup>99, DT99a, DT99b] en granos normales y correlaciones ferromagnéticas en granos de Cobre [DFC<sup>+</sup>98, GDMR99]. Un resumen de las técnicas espectroscópicas y desarrollos teóricos en relación con los granos metálicos puede encontrarse en [BvD99a, vD01].

Por varias razones los experimentos efectuados por RBT han atraído y han generado un gran volumen de investigación, basten como ejemplos las siguientes referencias [vDZGT96, BvDRT97,

BvD99b, SA96, BFV, BFV99, ML97, RCR98, RCR99, RZC99, RCE01, MFF98, BH98, BvD98, DS99, DS00, SDD<sup>+</sup>00, TT98, LFH<sup>+</sup>00, ZLMG02, SvDIL]. Vamos a resumir aquí las razones del por qué todo estos desarrollos:

1. Para granos de un radio  $r \geq 5\text{nm}$  las medidas de RBT revelaron un efecto de paridad [BRT96, RBT97, vDZGT96]. Un grano con un número par de electrones tiene un *gap* espectroscópico que en los granos con un número impar de electrones estaba ausente. Lo que supone una clara evidencia de la presencia de correlaciones de apareamiento superconductoras.
2. El *gap* espectroscópico para los granos con número par de electrones fue anulado aplicando un campo magnético externo, de modo que la desaparición de las correlaciones de apareamiento paramagnéticas puede ser estudiado en detalle [BvDRT97, BvD99b].
3. Debido al tamaño de los granos la teoría convencional de campo medio BCS no debería poder ser aplicable, por las siguientes razones: a) El espaciado de los niveles monoeléctronicos  $d \sim 1/Vol$  es comparable al *gap* superconductor de una muestra lo suficientemente grande como para que la teoría BCS sea aplicable, que denotaremos por  $\tilde{\Delta}$ . De modo que la aproximación de campo medio no es realista (pues requiere  $d \ll \tilde{\Delta}$ ) y b) el número de electrones de los granos está bien definido, de modo que se necesita una teoría donde el número de electrones esté fijado. Desde este punto de vista los experimentos de RBT estimularon los desarrollos teóricos de la teoría BCS.
4. Para los granos más pequeños ( $r \leq 3\text{ nm}$ ) medidos por RBT el *gap* espectroscópico no pudo medirse sin ambigüedad. Esta observación revivió una antigua pero fundamental cuestión: ¿Cual es el tamaño más pequeño de los granos para la existencia de superconductividad?. Anderson respondió a esta cuestión en 1959 [And59] arguyendo que si la muestra es tan pequeña que su espectro electrónico deviene discreto, los efectos superconductores no deberían ser posibles. Es decir, cuando el espaciado  $d$  es mayor que  $\tilde{\Delta}$ . Desde un punto de vista heurístico es obvio pues  $\tilde{\Delta}/d$  es el número de estados electrónicos libres que pueden correlacionarse entre si (aquellos con energías comprendidas en una región del orden de  $\tilde{\Delta}$  alrededor de  $\epsilon_F$ ), es decir, el número de pares de Cooper en el sistema. Cuando este número es  $\leq 1$ , claramente no tiene sentido llamar al sistema superconductor.

Aunque la respuesta de Anderson es correcta en general, genera nuevas cuestiones: ¿qué es lo que significa superconductividad en los granos superconductores, para los cuales los criterios estándar como la resistividad nula, el efecto Meissner y el efecto Josephson no son relevantes? ¿Qué ocurre en el régimen  $d \geq \tilde{\Delta}$  en el cual la superconductividad ha desaparecido? ¿Depende de la paridad este efecto? ¿Cómo es influenciado por un campo magnético? y por la temperatura? Todas estas preguntas han sido planteadas e investigadas con cierto detalle desde las mediciones de RBT.

La fuerza de apareamiento entre partículas forma parte de la esencia del problema cuántico de muchos cuerpos, y en especial reside en la naturaleza de los efectos encontrados en los granos superconductores.

El estudio de esta interacción fue fuertemente impulsada en la física nuclear. En gran cantidad de sistemas nucleares como materia nuclear o estrellas de neutrones el estudio del apareamiento

tiene una larga historia, ver por ejemplo [CMS59, ES60, Mig60]. Más recientemente en el campo de la astrofísica, una serie de satélites de rayos X (EXOSAT, ROSAT, y ASCA) ha obtenido una gran cantidad de datos sobre la emisión térmica en estrellas de neutrones. En el laboratorio, las capacidades actuales de los detectores y las facilidades de los iones pesados han estimulado una exploración de núcleos inestables, con especial énfasis en núcleos ricos en neutrones [MS93, Rii94]. Las correlaciones de apareamiento juegan un papel muy importante en los modelos de estructura nuclear y en los comportamientos de estos núcleos.

En virtud de su importancia a lo largo de esta tesis revisemos el desarrollo histórico del concepto de las fuerzas de apareamiento y su evolución en el tiempo.

La teoría BCS fue extendida a sistemas nucleares bajo la noción de parejas de nucleones acoplados a un estado de momento angular cero [Rac42, May50]. Una simple aplicación de la teoría BCS a los sistemas finitos encuentra dos principales dificultades. Primero, la función de onda BCS no es un autoestado del número de partículas, de modo que las fluctuaciones en el número de partículas es una característica en los sistemas finitos. Segundo, en los sistemas finitos, existe un valor crítico de la fuerza atractiva de apareamiento para la cual ninguna solución no trivial existe. Varias aproximaciones han sido propuestas para solucionar estas dificultades. La proyección al número de partículas [KLS61] después de la variación, que es válida para interacciones de apareamiento por encima de la crítica; y usando una proyección antes de la variación que es válida para todos los regímenes de la intensidad de la fuerza de apareamiento. Una alternativa a la última versión de la proyección es el método de Lipkin-Nogami [Lip60, Nog64]. Ha sido ampliamente utilizada con buenos resultados como en [HB00, HRB02].

Mientras que los cálculos basados en el campo medio usando interacciones de apareamiento son capaces de describir muchas de las propiedades de los sistemas finitos como puedan ser los núcleos, están muy lejos de ofrecer una solución al problema general de muchos cuerpos.

## 1.2 Motivaciones y estructura de la tesis

Nuestra motivación fundamental a lo largo de esta tesis ha sido la de encontrar la forma correcta de aplicar el método de la coordenada generadora (MCG), ampliamente utilizado en las aplicaciones a los sistemas nucleares, dentro del esquema de los granos superconductores. Basados en que el MCG es un método cuántico lo suficientemente general para tratar el problema de muchos cuerpos, el cual ofrece una forma relativamente sencilla de ir más allá del resto de aproximaciones usadas con frecuencia en la actualidad. Su planteamiento general y su interpretación en términos sencillos es una arma tremendamente eficaz que hemos querido explotar en la aplicación a los sistemas finitos. Así, desde este punto de vista, hemos querido demostrar la potencia y versatilidad en la que las aplicaciones del MCG permiten comprender la naturaleza de las correlaciones de apareamiento en los granos superconductores.

Para dicho fin esta tesis ha sido dividida en varias partes claramente diferenciadas:

En la parte II se aborda un resumen del montaje experimental y conclusiones fundamentales de las mediciones por parte de Ralph, Black y Tinkham. Se explicará la Física elemental de un

transistor monoelectrónico y su utilidad para determinar el espectro de los niveles electrónicos en un grano superconductor. Se destacarán especialmente las mediciones obtenidas del *gap* espectroscópico entre los granos con un número par de electrones e impar de electrones, que ponen de manifiesto remanentes de fenómenos superconductores en dichos sistemas.

La parte III de la tesis está dedicada a desarrollar la teoría que será usada a lo largo de todo el trabajo. A modo de introducción comenzamos con un resumen en el capítulo 3 sobre las propiedades de las correlaciones de apareamiento, cómo son entendidas en el contexto de los granos superconductores y más especialmente cómo deben ser extendidas para tratar los sistemas finitos. La teoría BCS ocupa el primer lugar en la revisión de la teoría que será utilizada. Así el capítulo 4 está dedicado al desarrollo sucinto de la teoría BCS aplicada a un sistema donde los niveles monoelectrónicos son discretos, tal como es el caso de los granos superconductores. Se introducirá asimismo el hamiltoniano reducido de apareamiento que constituirá el punto de partida y el modelo básico que será utilizado a lo largo de la tesis en las aplicaciones. Se discutirán también de forma cualitativa los resultados de campo medio BCS que puede ofrecer en los sistemas finitos. En el capítulo 5 se introduce el sistema canónico. Se estudiará cómo recuperar la simetría del número de partículas a partir de la teoría BCS. Llegaremos al formalismo denominado en la literatura como teoría BCS proyectada o simplemente PBCS. En el capítulo 6 se analizará la solución exacta del hamiltoniano de apareamiento reducido encontrada por Richardson en los años 60. Se destacará el método matemático ideado por Richardson para encontrar la solución exacta debido a su ulterior importancia en esta tesis, cuando se estudien hamiltonianos más generales de apareamiento. El capítulo 7 muestra el desarrollo teórico del método de la coordenada generadora MCG cuya aplicación a los granos superconductores será el trabajo original presentado en esta tesis. Destacaremos el *Ansatz* basado en el MCG propuesto para tratar las correlaciones de apareamiento. Ocupará una especial atención la discusión de la ecuación de Hill-Wheeler y el camino satisfactorio de su resolución numérica. El capítulo 8 supone la continuación natural del capítulo precedente. El método de la coordenada generadora será diseñado para su aplicación a los granos superconductores. Serán planteadas las dos variantes que surgen de aplicar el MCG conjuntamente con la teoría proyectada, MCGPAV y MCGVAP, y se analizarán las distintas coordenadas generadoras usadas en las aplicaciones.

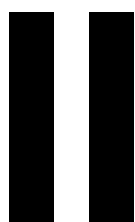
La parte IV está destinada a las aplicaciones de la teoría desarrollada en la parte III. El capítulo 9 expondrá los resultados numéricos de las aplicaciones en el modelo de apareamiento reducido. Se analizarán las principales magnitudes que caracterizan las propiedades superconductoras como la energía de condensación, correlaciones de apareamiento y la dependencia en la paridad. Pondremos especial atención en la comparación de todas las aproximaciones con la solución exacta de Richardson, analizando ampliamente a través de las funciones de onda colectivas el éxito del MCG en el tratamiento de las correlaciones en estos sistemas. En el capítulo 10 se introducen los modelos de Richardson-Gaudin basados en la interacción de apareamiento, que constituyen una generalización del hamiltoniano de apareamiento reducido. Estos modelos incluyen tres familias (racional, trigonométrica e hiperbólica) para las cuales puede ser obtenida la solución exacta. Se adaptarán para estos hamiltonianos las teorías BCS, PBCS y el MCG que serán aplicadas en el capítulo siguiente. Será en el capítulo 11 donde se analicen las aplicaciones del MCG en los hamiltonianos generalizados. En especial serán estudiadas la evolución de la energía de condensación con el número de electrones del sistema y el análisis de las funciones de onda colectivas obtenidas con el MCG. Por completitud también serán comparados con los resultados obtenidos por el resto



de aproximaciones. El capítulo 12 contiene las conclusiones finales y perspectivas de trabajo futuro.

Finalmente la parte V de la tesis es un amplio compendio de fórmulas y explicaciones en forma de apéndices que han sido utilizadas en la tesis.





# **EXPERIMENTOS**

---



## DETALLES EXPERIMENTALES

En 1995 el grupo formado por D. C. Ralph, C. T. Black y M. Tinkham (RBT) fue capaz de construir un transistor monoeléctrico (*SET, single-electron transistor*) [RBT95] en cuyo interior se encontraba un grano metálico de aluminio formando una pequeña isla de 10nm de diámetro aproximadamente. La técnica experimental que desarrolló el equipo RBT en aquel año abrió la puerta a la investigación de estos sistemas.

Estudiando la corriente túnel a través del grano RBT consiguieron la primera medida del espectro discreto de un grano metálico individual. Todos estos resultados fueron reportados en una exitosa serie de trabajos [BRT96, RBT96, RBT97].

En la fig. 2.1 se ilustra en forma esquemática el montaje experimental que usaron en sus trabajos, el *SET* se conecta a través de barreras de unión túnel a un soporte externo (*lead* en la figura). El espectro electrónico del grano puede obtenerse midiendo la corriente túnel a través del grano como función del voltaje externo  $V$ , el voltaje de puerta (*gate voltage*)  $V_g$  y el campo magnético  $H = h/\mu_B$ , siendo  $\mu_B = 0.0571$  meV/T. El sistema opera con una temperatura constante de 50 mK.

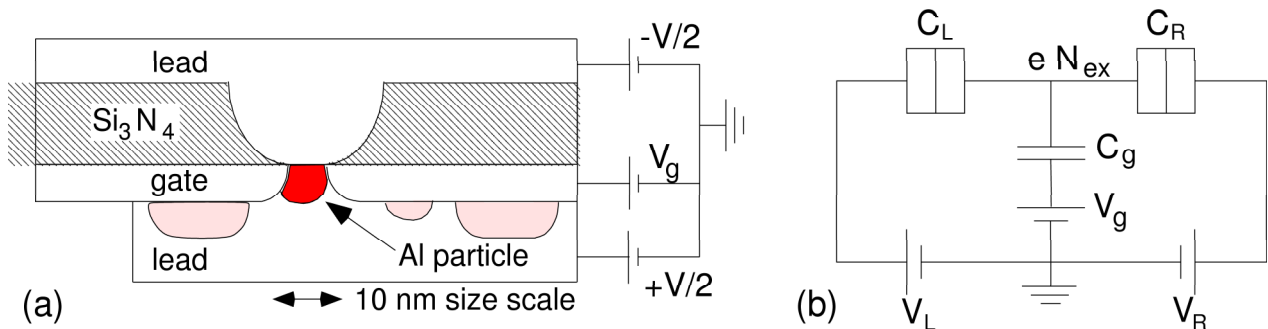


Figura 2.1: Representación experimental esquemática: en (a) un SET con un grano metálico de aluminio formando una isla central. En (b) el circuito eléctrico correspondiente.

El grano metálico de aluminio que fue usado en [RBT97](Figs. 1(b),2,3) tiene los siguientes parámetros físicos: el radio estimado es de  $r \simeq 4.5$  nm, si se asume que el grano es semiesférico esto implica que su volumen aproximado es de  $5.7$  nm<sup>3</sup> con un número total de electrones de conducción  $N$  aproximado de  $3 \cdot 10^4$ . La distancia entre niveles electrónicos  $d$  puede ser estimada mediante la aproximación de electrones libres, para la cual se tiene  $d = 2\pi^2 \hbar^2/mk_F \text{Vol}$ . Asumiendo que la región es cercana a la superficie de Fermi, se obtiene  $d \simeq 0.45$  meV. Las capacidades

correspondientes a dicho sistema eran  $C_1 = 3.5$  aF,  $C_2 = 9.4$  aF,  $C_g = 0.09$  aF y la energía de carga (energía electrostática)  $E_C = e^2/2C_{tot} = 46$  meV. La corriente túnel es del orden de  $10^{-10}$  A, implicando que el tiempo en promedio entre dos procesos túnel consecutivos es de  $2 \cdot 10^{-9}$  s.

En el experimento de RBT la escala de la energía de carga  $E_C$  era mucho más grande comparado con las otras escalas de energía, como el *gap* ( $\tilde{\Delta} \approx 0.38$  meV), el voltaje ( $V \leq 1$  meV) y la temperatura ( $T = 50$  mK). En consecuencia las fluctuaciones en el número de electrones quedan fuertemente inhibidas, de modo que las superposiciones coherentes de estados con diferente número de partículas no deben considerarse.

Por otro lado, la condición que determina cuáles son los autoestados electrónicos del grano que pueden experimentar efecto túnel para un valor dado de los voltajes  $V$  y  $V_g$  involucra diferencias entre las energías de un grano con un número fijo de partículas  $N$  o  $N + 1$ :

$$\Delta E_{if} \equiv (E_f^N + E_C^N) - (E_i^{N+1} + E_C^{N+1}). \quad (2.1)$$

Estas diferencias corresponden al coste de energía necesario para aquellos procesos túnel  $|i\rangle_{N+1} \rightarrow |f\rangle_N$  por los cuales el electrón queda fuera o dentro del grano. El estado  $|f\rangle_N$  especifica precisamente un estado discreto del grano que posee  $N$  electrones con un valor propio de la energía  $E_f^N + E_C^N$ . Siguiendo el modelo ortodoxo de la carga de un SET se puede escoger la energía electrostática del grano  $E_C$  (relativa a un grano neutro de  $N_0$  electrones) como  $E_C^N = E_C(N - N_0 - Q_g/e)^2$ , con  $Q_g = (C_g V_g + const)$ . Notemos que se está asumiendo que la interacción de Coulomb está lo suficientemente apantallada de forma que su único efecto es desplazar todos los estados con un número  $N$  de electrones con la misma constante  $E_C^N$ .

Ralph, Black y Tinkham fueron capaces de extraer la diferencia de energías  $\Delta E_{if}$  a partir de sus medidas experimentales, expliquemos la forma de obtenerlo. Si se examina la conductancia diferencial  $dI/dV$  como función del voltaje  $V$  (manteniendo constante  $V_g$ ) esta presenta un pico cuando la cantidad  $eV$  multiplicada por un cociente de capacidades fijo es igual a una de las diferencias de energías  $\Delta E'_{if}$ , en este preciso momento otro canal que lleva corriente túnel a través del grano queda abierto como se representa esquemáticamente en la fig. 2.2.

Si se representa la posición de cada pico de conductancia como función del campo magnético  $h$  se obtiene el espectro túnel experimental. Así queda reflejado en la fig. 2.3, en la cual cada una de las líneas refleja la dependencia del campo magnético  $H$  sobre una de las diferencias de energía  $\Delta E(h)$ .

Es importante hacer notar que el umbral experimental de energía (para  $h = 0$ ) el proceso túnel de más baja energía no aporta información, pues depende del cambio que sufre la energía de carga general debida a los procesos túnel,

$$\delta E_C = E_C - E_C^{N+1} = E_C \left[ Q_g/e - (N - N_0 \pm \frac{1}{2}) \right], \quad (2.2)$$

que depende (a través de  $Q_g$ ) como una función desconocida del voltaje  $V_g$ . Esta dependencia con  $V_g$  puede ser cuantificada estudiando las oscilaciones de Coulomb que ocurren como función

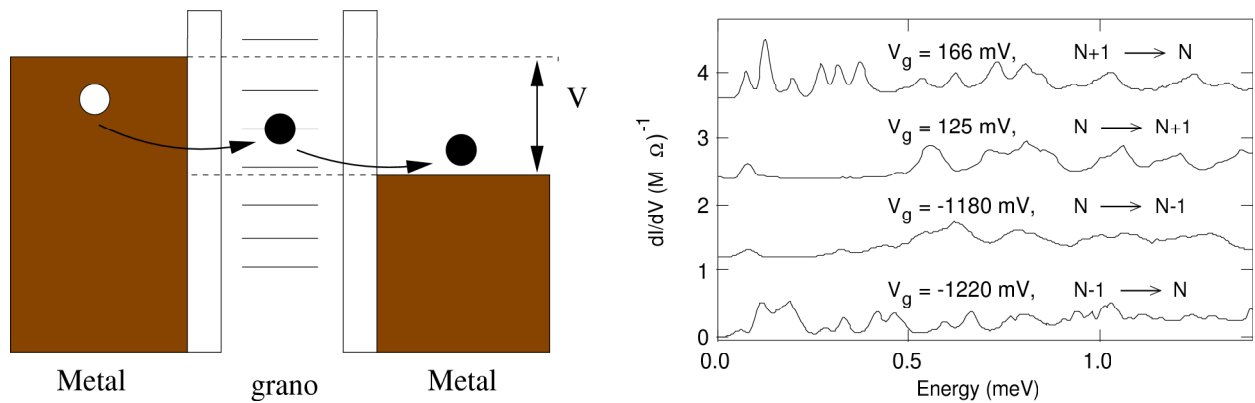


Figura 2.2: Representación pictórica de una medida  $dI/dV$ : como se aprecia en la figura de la izquierda, el número de canales queda determinado por el voltage de transporte  $V$ , en el dibujo tenemos tres canales abiertos. En la gráfica de la derecha se representa la conductancia diferencial  $dI/dV$  medida por RBT, revelando así los niveles discretos del grano.

de  $V_g$  y  $V$  constante.

Desafortunadamente, en este caso particular existe una complicación debido a la pequeñez en la capacidad del sustrato. Para que  $Q_g$  pueda recorrer un período completo de  $2e$ , el voltaje  $V_g$  debe ser barrido a través de un rango enorme ( $2e/C_g \approx 3.5V$ ).

RBT observaron desplazamientos rígidos pequeños del espectro túnel completo a valores aleatorios de  $V_g$ . Estos efectos presumiblemente son debidos a cambios monoeléctricos en la carga contenida en otros granos metálicos en las proximidades del grano de estudio. Estos cambios producen desplazamientos violentos en el potencial electrostático del grano, y se desvirtúa la periodicidad  $2e$  que de otra forma se esperaría encontrar en el espectro.

En contraste con la energía umbral, sin embargo, la separación entre líneas,

$$\Delta E_{if'} - \Delta E_{if} = E_{f'}^N - E_f^N, \quad (2.3)$$

es independiente del voltaje  $V_g$  y por tanto son conocidos de forma absoluta. Simplemente corresponden a las diferencias de energías para un número constante  $N$ , es decir, se obtiene el espectro de excitación de los estados con número de electrones constante.

Sin duda alguna, la característica más importante de los datos obtenidos en las mediciones del espectro túnel es la presencia (ausencia) de un *gap* espectroscópico  $2\Omega_e > d$  entre las dos líneas más bajas correspondientes a las transiciones impar-a-par (par-a-impar) del espectro medido, ver fig. 2.3.

Este hecho revela la existencia de *correlaciones de apareamiento* entre los electrones del grano. En los granos metálicos con un número de electrones par, los estados excitados involucran como poco dos estados de cuasipartícula BCS y por esto quedan situados muy por encima del estado fundamental. Mientras que en los granos con un número impar de electrones siempre tienen como

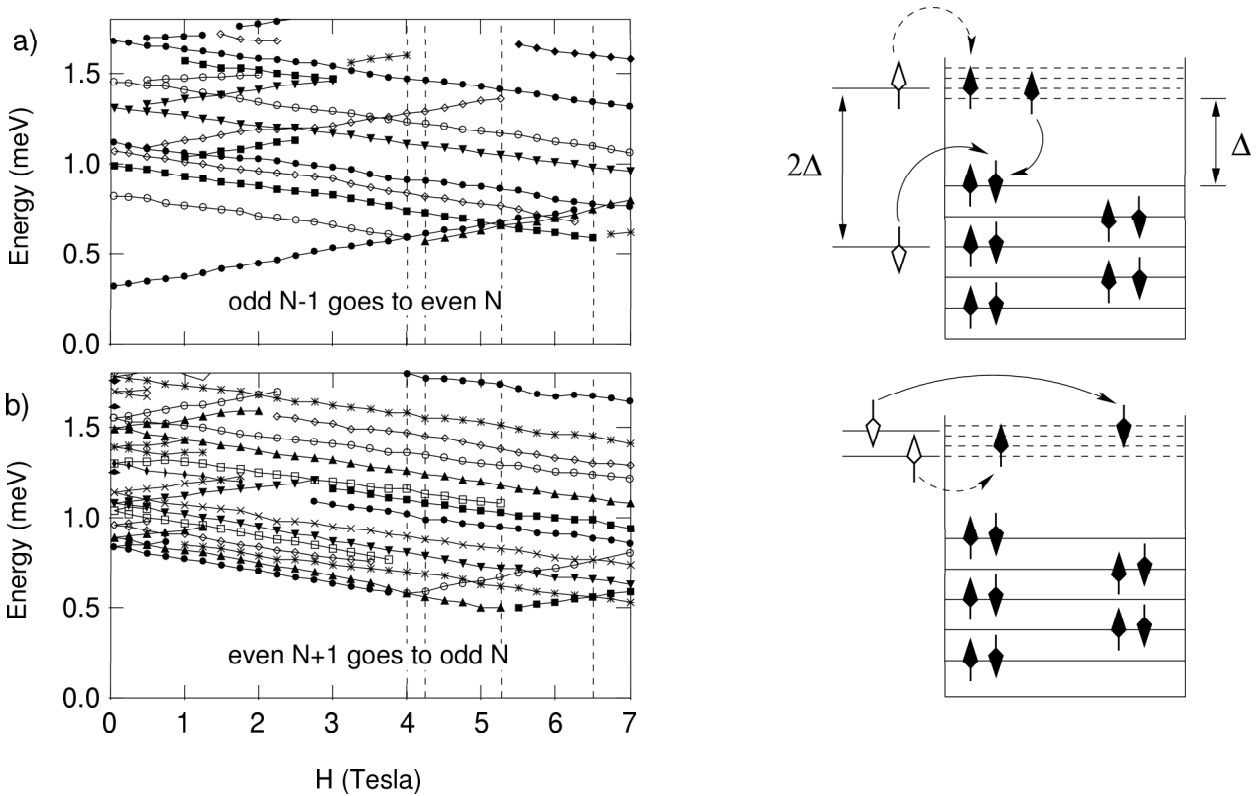


Figura 2.3: Espectro túnel experimental medido por RBT en [RBT97]. La distancia entre líneas proporcionan el espectro de excitación de un grano par (a) e impar (b) respectivamente.

poco un estado de cuasipartícula y las excitaciones no superan un valor extra del *gap*.

En el lado derecho de la fig. 2.3 se encuentran los correspondientes procesos túnel para ambos procesos impar-a-par y par-a-impar. En el primer caso, el grano impar inicial posee un electrón desapareado y el electrón del sustrato que efectúa el proceso túnel al grano tiene dos posibilidades: puede ir al estado inverso temporal que ocupa el primer electrón y formar una pareja de electrones, o bien puede mediante efecto túnel ir a otro estado dejando dos electrones desapareados en el grano. De acuerdo con la teoría BCS convencional este proceso cuesta al menos la energía extra  $2\tilde{\Delta}$ .

Por otro lado, en el proceso par-a-impar el electrón del sustrato no puede encontrar un electrón desapareado en el grano y tendrá que superar el *gap*, pero una vez tenga energía suficiente para hacerlo no tendrá que superar *gaps* extras para alcanzar estados excitados más altos.





**TEORÍA**

---



## NATURALEZA DE LAS CORRELACIONES DE APAREAMIENTO

### 3.1 Introducción

Las energías medidas en los experimentos de RBT corresponden al espectro de energía de un grano metálico que posee un número de electrones fijo. En lo que sigue trataremos a este grano como si estuviera completamente aislado del resto.

Si se considera un metal superconductor aislado es necesario preguntarse cómo se incorporará en la teoría la condición de que el número de partículas sea constante y de qué forma afecta este cambio. En líneas generales esta cuestión ha sido bien comprendida y ya fue discutida ampliamente en los albores de la teoría BCS de Bardeen, Cooper y Schrieffer de la superconductividad [BCS57], y muy en particular en todas las aplicaciones a los sistemas nucleares que rápidamente comenzaron a realizarse a partir de ese momento. Una referencia amplia a este respecto es [RS80](p.439), o bien las conclusiones generales obtenidas en [Lip60].

La noción de *mezcla de pares* es uno de los conceptos fundamentales que se desprenden de la teoría BCS y que se esconde en la esencia de la naturaleza de las fuerzas de apareamiento. Sin embargo la teoría BCS está formulada en un contexto gran canónico donde el número de partículas no está fijado más que en promedio. Afortunadamente la teoría BCS puede ser extendida fácilmente al sistema canónico, donde el número de partículas está fijado, como veremos a continuación.

La teoría convencional BCS ofrece una descripción en el marco gran canónico de las correlaciones de apareamiento las cuales son inducidas mediante la presencia de una interacción atractiva que actúa entre pares de electrones. Dicha interacción puede describirse a través del siguiente hamiltoniano:

$$H_{BCS} = -V \sum_{kk'} c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+} \quad \text{con } V > 0. \quad (3.1)$$

Los operadores  $c_{k\pm}$ , ( $c_{k\pm}^\dagger$ ) son los operadores usuales de destrucción, (creación) de electrones en los estados  $|k\pm\rangle$ , los cuales entre si son copias reverso temporales uno del otro. De acuerdo con la teoría BCS el estado fundamental de un sistema gran canónico viene representado en el espacio de Fock a través del siguiente *Ansatz*:

$$|BCS\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \quad (u_k^2 + v_k^2 = 1). \quad (3.2)$$

Este estado no es autoestado del operador número de partículas  $\hat{N} = \sum_{k\sigma=\pm} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$  y el número de partículas en el sistema dentro de la teoría BCS queda fijado únicamente en promedio  $\langle BCS | \hat{N} | BCS \rangle = N$ . La definición usada comunmente para el parámetro de orden de la teoría BCS, el cual caracteriza la naturaleza superconductora del estado (3.2),

$$\Delta_{BCS} = V \sum_k \langle BCS | c_{k+} c_{k-} | BCS \rangle, \quad (3.3)$$

sólo tiene sentido para un sistema gran canónico, pues en el sistema canónico la expresión (3.3) se anula idénticamente. En esencia, la existencia de (3.3) en la teoría BCS implica una rotura espontánea de la simetría del número de partículas, y conlleva asociada la connotación de transición de fase.

## 3.2 Descripción canónica de la mezcla de pares

A tenor de lo discutido en la sección anterior cualquier teoría en la que quede fijado el número de partículas debe traer consigo modificaciones en la teoría BCS convencional. En particular, es necesario una nueva definición para el parámetro de orden  $\Delta_{BCS}$ . Igualmente se hace necesario cambiar las connotaciones que envuelve este parámetro. Por ello, en el sistema canónico es más apropiado llamarlo *parámetro de apareamiento* que parámetro de orden, evitando así cualquier relación con la noción de transición de fase (que necesariamente necesita la condición  $N \rightarrow \infty$ ).

El parámetro de apareamiento en el sistema canónico debe capturar, al igual que lo hace en la teoría BCS, la naturaleza del estado fundamental superconductor.

Una interacción de apareamiento atractiva inducirá correlaciones de apareamiento en el estado fundamental las cuales involucran mezcla de pares sobre la energía de Fermi  $\epsilon_F$  (ver [vDZGT96]), es decir, existe una amplitud de probabilidad no nula de encontrar un par de estados inverso temporales entre sí que se encuentren ocupados por encima de  $\epsilon_F$  o bien se encuentren vacíos por debajo de  $\epsilon_F$ . En efecto, el *Ansatz* (3.2) expresa lo que acabamos de decir permitiendo  $v_k \neq 0$  para  $\epsilon_k > \epsilon_F$  y  $u_k \neq 0$  para  $\epsilon_k < \epsilon_F$ .

Como quiera que el hamiltoniano  $\hat{H}_{BCS}$  conmuta con el operador número de partículas  $[\hat{H}_{BCS}, \hat{N}] = 0$ , se debería esperar que la esencia de la teoría BCS, esto es, la presencia de electrones apareados (mezcla de pares) y la razón de por qué esto ocurre pueda ser formulada igualmente en el sistema canónico. Esta idea se confirma si la amplitud  $\bar{v}_k \equiv \langle c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k+} c_{k-} \rangle^{1/2}$  de encontrar un par de estados ocupados no es nula cuando  $\epsilon_k > \epsilon_F$ , y al mismo tiempo la amplitud  $\bar{u}_k \equiv \langle c_{k-} c_{k+} c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger \rangle^{1/2}$  de encontrar un par de estados vacíos no es nula para  $\epsilon_k < \epsilon_F$ . Notemos que hemos usado la notación  $\bar{u}_k, \bar{v}_k$  a diferencia de  $u_k, v_k$  usadas en la teoría BCS.

De forma intuitiva, es posible argumentar la razón de por qué  $\hat{H}_{BCS}$  induce mezcla de pares en el estado fundamental *exacto*  $|S\rangle$ . El proceso de desplazar las amplitudes de apareamiento de la región energética por debajo de  $\epsilon_F$  hacia la región energética por encima de  $\epsilon_F$  cuesta energía cinética, sin embargo abre la posibilidad de que en el espacio de fases suceda la interacción entre pares (*pair-scattering*). El resultado global es que el valor promedio de la energía  $\langle S|\hat{H}_{BCS}|S\rangle$  disminuya. De forma más explícita: en  $\langle S|\hat{H}_{BCS}|S\rangle$ , el término  $kk'$  puede no ser nulo sólo si se cumplen las dos condiciones siguientes  $c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+} |S\rangle \neq 0$  (implicando  $(v_{k'})_S \neq 0$  y  $(u_k)_S \neq 0$ ) y  $\langle S|c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+} \neq 0$  (implicando  $(v_k)_S \neq 0$  y  $(u_{k'})_S \neq 0$ ). Mediante la mezcla de pares el sistema puede así acumular los estados suficientes para los cuales simultáneamente tengan  $(v_k)_S \neq 0$  y  $(u_k)_S \neq 0$ , lo cual se traduce en disminuir la energía del estado fundamental sobrecompensando así el gasto de energía cinética que envuelve la mezcla de pares.

Con respecto a las excitaciones, estas disminuyen en general la intensidad de las correlaciones de apareamiento a partir del gasto energético en la ruptura de pares por el fenómeno de bloqueo. En virtud de este efecto uno de los niveles no permite la interacción entre pares, quedando en consecuencia bloqueado.

Los argumentos mencionados más arriba ilustran que no hay nada inherente sobre la mezcla de pares e interacción entre ellos en el sistema gran canónico. De forma natural se han sugerido dos definiciones que describen la mezcla de pares en el sistema canónico. La definición más natural consiste en definirlo como en la teoría BCS  $\bar{\Delta}' \equiv V \sum_k \bar{u}_k \bar{v}_k$  propuesto en [vDZGT96], o el propuesto por F. Braun y J. von Delft [BvD98]:

$$\bar{\Delta} \equiv V \sum_k \left[ \langle c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle - \langle c_{k+}^\dagger c_{k+} \rangle \langle c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle \right]^{1/2}. \quad (3.4)$$

Ambas definiciones están construidas de tal forma que cuando son evaluadas con el estado  $|BCS\rangle$  se reducen a la expresión  $\Delta_{BCS}$ . Una de las ventajas que posee la definición (3.4) es que el término que está sustraído  $\langle c_{k+}^\dagger c_{k+} \rangle \langle c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle$  enfatiza de forma transparente la naturaleza de apareamiento de las correlaciones superconductoras. Así, por ejemplo  $\bar{\Delta}$  será pequeño si la ocupación de  $|k+\rangle$  no tiene correlación con la de  $|k-\rangle$ , como es normal en el líquido de Fermi. El comportamiento general de (3.4) exige un cálculo explícito en el sistema canónico, el cual será abordado con detalle más adelante.

### 3.3 Sobre la ruptura de la simetría *gauge*

Generalmente en la teoría convencional BCS la propiedad que define la superconductividad es la ruptura de la simetría *gauge* por el parámetro de orden  $\Delta_{BCS}$ .

Este concepto es ilustrado fácilmente a partir de los valores que toma  $\Delta_{BCS}$ , a saber, si no es nulo entonces tiene una fase ( $\phi$ ) definida y por tanto no es invariante porque bajo la transformación  $c_{k\sigma} \rightarrow e^{i\phi} c_{k\sigma}$ , el parámetro  $\Delta_{BCS}$  se transforma en  $e^{2i\phi} \Delta_{BCS}$ . Notemos que por contra, esta discusión no puede realizarse en el sistema canónico. Primero porque en el sistema canónico como ya se discutió  $\Delta_{BCS} = 0$  y segundo y de forma más fundamental, la ruptura de simetría *gauge* presupone

de forma necesaria el sistema gran canónico, pues fase y número de partículas son variables canónicamente conjugadas una de la otra. Mediante consideraciones formales se llega a la conclusión de que el parámetro de orden puede adquirir una fase definida sólo si al número de partículas se le permite fluctuar, es decir, que sea un sistema gran canónico.

Es necesario hacer notar que, sin embargo, existen ciertas situaciones experimentales donde el número de partículas fluctúa, como en el efecto Josephson, en consecuencia los parámetros de orden adquieren una fases definidas, y su diferencia de fase se convierte en una cantidad mensurable. Sin embargo, para un sistema superconductor sin interacción con ningún otro sistema y con el número de partículas fijo la fase del parámetro de orden no es observable, y el concepto de la ruptura de la simetría *gauge* a través de un parámetro de orden con una fase definida pierde su utilidad.

#### 3.4 Teorías con el número fijo de partículas

Por lo discutido en las secciones previas es necesario para el estudio de sistemas finitos como los granos metálicos superconductores desarrollar una teoría donde el número de partículas esté fijado. Antes de considerar en detalle el formalismo que usaremos veamos en esta sección las generalidades que las teorías aplicadas a sistemas canónicas deben presentar.

El objetivo es construir un estado variacional que sea a su vez autoestado del operador número de partículas. Una posibilidad es la llamada *proyección* del estado BCS  $|BCS\rangle$  a un estado con número de partículas  $N$ , esta idea fue sugerida por Bardeen, Cooper y Schrieffer [BCS57]. Dicha tarea puede conseguirse matemáticamente mediante la integral de proyección:

$$|N\rangle \sim \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i\phi N} \prod_k (u_k + e^{2i\phi} v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \quad (3.5)$$

Esta forma de obtener un estado con el número de partículas deseado a partir del estado BCS fueron desarrolladas en gran detalle en física nuclear, el libro de P. Ring y P. Shuck [RS80] ofrece una extensa literatura (capítulo 11), una referencia más moderna es [BFV]. La aproximación más simple en este esquema es la llamada *proyección después de la variación* (*projection after variation* PAV, adoptaremos estas siglas en inglés de aquí en adelante). Aquí el valor de la energía  $\langle BCS|\hat{H}|BCS\rangle$  es minimizado respecto de los parámetros variacionales  $v_k$ , los cuales son luego insertados en  $|BCS\rangle$  y todos los valores esperados son evaluados usando este último en lugar del estado  $|BCS\rangle$ . Esta recuperación del número de partículas correcto conlleva la mejora del valor de la energía con respecto a su valor BCS. Es posible mejorar los resultados usando una estrategia más ambiciosa y sofisticada, es la llamada *variación después de la proyección* (*variation after projection* VAP, adoptaremos estas siglas en inglés de aquí en adelante). Ahora es la cantidad  $\langle BCS|\hat{H}|BCS\rangle_N$  la que se minimiza respecto de los  $v_k$  [DMP64], en este método la función  $|BCS\rangle$  y las cantidades  $u_k, v_k$  pierden su significado usual de la teoría BCS.

Existen numerosas y extensas aplicaciones sobre estas y similares aproximaciones, como por ejemplo las aplicaciones que suprimen las fluctuaciones en el número de partículas con un término adicional  $N^2$  en el hamiltoniano como fue introducido por Lipkin [Lip60] y Nogami *et al*

[Nog64, NZ64, Nog65, GN66].

Con todas estas aplicaciones en los sistemas nucleares se llega a las siguientes conclusiones generales: para un número de partículas suficientemente pequeño, como en los núcleos, la implementación de técnicas de proyección es tratable, pero pesado y engorroso. Para un gran número de partículas los métodos resultan intratables, sino que además es innecesaria, pues se demuestra que las correcciones que son del orden de  $N^{1/2}$  son despreciables.

Sin embargo, en los núcleos las correcciones al estado sin proyectar son pequeñas en la mayoría de los casos, la excepción sucede para interacciones de apareamiento muy fuertes. De esta forma, en la mayoría de los casos los sistemas con un número fijo de partículas pueden ser descritos perfectamente por el estado BCS en el sistema gran canónico. En este caso, la indefinición en el número de partículas y la ruptura de la simetría *gauge* simplemente tiene la ventaja de convertirse en un método de cálculo muy sencillo, permite el uso de una función de onda variacional simple en la cual las amplitudes  $v_k$  pueden ser encontradas con un mínimo de esfuerzo. La costumbre de usar funciones de onda que rompen la simetría en aras de un cálculo más sencillo es usado usualmente en la física nuclear (para una descripción más elegante y profunda ver [RS80]).

Las conclusiones anteriores implican que la estrategia basada en describir los sistemas finitos mediante la aproximación BCS debería ser suficiente para una descripción *cualitativa* de las correlaciones de apareamiento en granos metálicos aislados, cuantitativamente esta aproximación se espera que no tenga validez en el límite en el que el espaciado entre los niveles sea grande, lo que corresponde a un fuerte acoplamiento en el caso nuclear.





# APROXIMACIÓN GENERALIZADA DE CAMPO MEDIO. TEORÍA BCS.

## 4.1 Introducción

Es el momento de comenzar a desarrollar las distintas aproximaciones que vamos a utilizar en el estudio de las propiedades superconductoras de los granos superconductores. En todo nuestro estudio despreciaremos los efectos de la temperatura distinta de cero, es decir todas nuestras aplicaciones serán para  $T = 0$ , desde el punto de vista experimental esto queda justificado porque los experimentos de RBT están realizados a temperatura  $T = 50$  mK la cual es mucho más pequeña que el resto de las escalas de energía como son el espaciado entre niveles electrónicos  $d$  y el *gap* superconductor para el sistema infinito  $\tilde{\Delta}$ .

Estudiaremos las propiedades más elementales de estos sistemas usando el hamiltoniano de apareamiento más sencillo que se puede concebir. Comenzamos exponiendo la formulación de campo medio, en nuestro caso esta aproximación la constituye la teoría BCS.

## 4.2 El Modelo

Vamos a adoptar como hamiltoniano más sencillo que incluya una interacción de apareamiento el llamado hamiltoniano reducido BCS, usado ampliamente, vasten unos ejemplos [Kaw80, Kaw81, vDZGT96, BvDRT97, BvD99b]:

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma=\pm} (\epsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - G \sum_{kk'} c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+} \quad (4.1)$$

Adoptamos una base de partículas formada por estados inversos temporales  $|k\pm\rangle$  de forma que cada nivel puede estar como máximo ocupado por un par de electrones. Las energías de los estados  $|k\pm\rangle$  vienen dadas por  $\epsilon_k$  (energías de partícula individual), debido a la repulsión de los niveles las energías  $\epsilon_k$  quedarán aproximadamente equiespaciadas. Las fluctuaciones en los espaciados de los niveles electrónicos han sido estudiadas con métodos de la teoría de las matrices aleatorias (*Random Matrix Theory*) [SA96] llegando a resultados cualitativamente similares a los que se obtienen asumiendo equiespaciado. Debido a esto y por simplicidad vamos a escoger un espectro completamente uniforme con espaciado de niveles  $d$ , es decir  $\epsilon_k = kd$ .

## 4 Desarrollos en teorías de muchos cuerpos para sistemas superconductores finitos

Para un sistema con un número total de electrones  $N = 2n_0 + p$  siendo  $n_0$  el número de pares y  $p$  la paridad de número ( $p = 0$  ( $p = 1$ ) para un sistema con un número par (impar) de electrones). Usaremos la etiqueta  $k = 0$  para el primer nivel cuya ocupación en el estado fundamental ( $T = 0$ ) no sea 2 sino  $p$ .

La interacción de apareamiento incluye sólo estados dentro del corte (*cutoff*) dictado por la frecuencia de Debye,  $|\epsilon_k| < \omega_D$ . Por conveniencia la constante de interacción  $G$  se escribirá como  $G = \lambda d$ , donde  $\lambda$  es un parámetro adimensional, llamado usualmente la constante de acoplo BCS. El límite termodinámico del modelo ( $N \rightarrow \infty$ ) se alcanza cuando  $d \rightarrow 0$  donde el *gap* en este límite resulta ser  $\tilde{\Delta} = \omega_D / \sinh(1/\lambda)$ .

### 4.3 El Ansatz variacional BCS

El Ansatz BCS es capaz de capturar la esencia entre la diferencia de un sistema con un número par e impar de electrones, obviamente sólo en el caso par todos los electrones pueden formar pares correlacionados. Dicha situación queda manifiesta mediante los siguientes Ansatz dependientes de la paridad.

$$\begin{aligned} |BCS\rangle_p &= \prod_k (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle, \\ |BCS\rangle_i &= c_j^\dagger \prod_{k \neq j} (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \end{aligned} \quad (4.2)$$

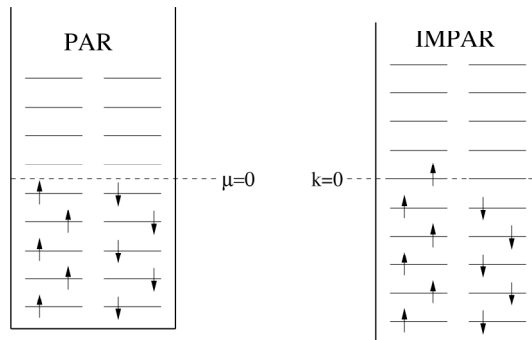


Figura 4.1: Descripción pictórica del Ansatz BCS (4.2) para el estado fundamental de un sistema con un número par e impar de electrones. Cada nivel del sistema está representado por una línea horizontal. En ausencia de correlaciones de apareamiento los niveles estarán vacíos o completamente llenos. La diferencia entre el sistema par y el impar está en el nivel bloqueado presente en el caso impar, y la diferente posición del potencial químico.

La fig. 4.1 representa esquemáticamente la esencia de los estados (4.2): mientras todos los electrones pueden correlacionarse formando pares en el caso par, un electrón descorrelacionado se sitúa en la superficie de Fermi en el caso impar.

Además, el potencial químico ( $\mu$ ) en el caso par se sitúa aproximadamente a mitad de camino entre dos niveles monoparticulares mientras que en el caso impar se establece exactamente en el nivel bloqueado. Además, el potencial químico en el caso par se mantiene aproximadamente a mitad de camino entre dos niveles monoparticulares mientras que en el caso impar se sitúa exactamente en el nivel bloqueado.

Las cantidades  $u_k, v_k$  en las expresiones (4.2) son los parámetros variacionales, aunque pueden ser complejos, pueden asumirse reales sin pérdida de generalidad. Escogemos que el productorio corre sobre la mitad del espacio de configuraciones ( $k > 0$ ) (para cada estado  $k$  existe un estado conjugado inverso temporal, generando así todo el espacio de configuraciones del sistema). Las amplitudes al cuadrado  $v_k^2(u_k^2)$  representan la probabilidad de que un cierto estado formado por pares esté ocupado (desocupado). Estas amplitudes determinan por completo el estado del sistema. Son conocidas mediante el principio variacional de Ritz, es decir, los parámetros se encuentran buscando el mínimo de la energía. Ambas amplitudes ( $u_k, v_k$ ) no son del todo independientes ya que están ligadas mediante la condición de normalización  $\langle BCS | \hat{H} | BCS \rangle = 1$ , lo que implica la siguiente condición:

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad (4.3)$$

Es importante hacer notar que el estado  $|BCS\rangle$  es una superposición de diferentes números de pares, es decir, al no poseer el *Ansatz* (4.2) un determinado número de partículas, éste se puede escribir como una superposición de estados con diferentes número de partículas:

$$|BCS\rangle = \sum_{v=0}^{\infty} \frac{1}{v!} (A^\dagger)^v |-\rangle \quad (4.4)$$

siendo  $A^\dagger$  un operador de creación de pares generalizado

$$A^\dagger = \sum_k \frac{v_k}{u_k} c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger \quad (4.5)$$

En la expresión anterior se puede ver como el estado  $|BCS\rangle$  se descompone en una suma de estados con diferentes número de partículas, así por ejemplo la componente que tiene el número de partículas  $N$  es la correspondiente a  $(A^\dagger)^{N/2}$ .

### 4.3.1. Las ecuaciones BCS

Como hemos explicado en la sección anterior los parámetros variacionales  $u_k, v_k$  del *Ansatz* BCS (4.2) son determinados a partir de la variación de la energía, siguiendo el principio de variacional de Ritz. Esta variación está restringida por la condición suplementaria de que el valor esperado del número de partículas  $\hat{N}$  tenga el valor deseado,

$$\langle BCS | \hat{N} | BCS \rangle = 2 \sum_k v_k^2 = N \quad (4.6)$$

Esta condición determina el potencial químico  $\mu$ , el cual representa el incremento de la energía ante un cambio del número de partículas.

Encontremos ahora el conjunto de ecuaciones que deben cumplir las amplitudes  $(u_k, v_k)$  para satisfacer el principio variacional de Ritz y la condición (4.6). Para ellos hemos de evaluar primero la función  $E' = \langle BCS | \hat{H}' | BCS \rangle$  (con  $\hat{H}' = \hat{H} - \mu \hat{N}$ ) y luego minimizarla sujeta a la ligadura (4.6). En lo siguiente tratamos el caso del sistema con un número par de electrones ( $p = 0$ ), el caso impar ( $p = 1$ ) será tratado aparte más adelante.

El valor esperado de la energía  $E'$  resulta ser:

$$E' = \langle BCS | \hat{H}' | BCS \rangle = 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - G \left( \sum_k u_k v_k \right)^2 - G \sum_k v_k^4 \quad (4.7)$$

El último término de la expresión anterior, proporcional a  $v_k^4$ , no es extensivo y por tanto usualmente es despreciado en el límite termodinámico  $N \rightarrow \infty$  donde únicamente los efectos proporcionales al tamaño del sistema son de interés. En nuestro caso es necesario mantenerlo porque en sistemas finitos no es despreciable.

El principio variacional de Ritz reza de la forma siguiente,

$$\delta \langle BCS | \hat{H}' | BCS \rangle = 0 \quad (4.8)$$

La variación  $\delta$  se realiza respecto a los parámetros  $u_k, v_k$ , que unido a la condición de normalización  $u_k^2 + v_k^2 = 1$  hace que la variación recaiga en solamente uno de los parámetros, en este caso  $v_k$ , de forma que:

$$\delta \langle BCS | \hat{H}' | BCS \rangle = \frac{\partial}{\partial v_k} \langle BCS | \hat{H}' | BCS \rangle; \quad \frac{\partial}{\partial v_k} = \frac{\partial}{\partial v_k} - \frac{v_k}{u_k} \frac{\partial}{\partial u_k} \quad (4.9)$$

aplicando esta definición a la expresión para la energía (4.7) se encuentra:

$$4(\epsilon_k - \mu)v_k - 2G \left( \sum_l u_l v_l \right) u_k - 4Gv_k^3 - \frac{v_k}{u_k} \left[ -2G \left( \sum_l u_l v_l \right) \right] v_k = 0 \quad (4.10)$$

Como vemos, todas las ecuaciones están acopladas por el término  $G \left( \sum_k u_k v_k \right)$ , que es precisamente el parámetro de orden o *gap* de la teoría BCS  $\Delta_{BCS}$ ,

$$\Delta_{BCS} = G \sum_k u_k v_k \quad (4.11)$$

Agrupando el término  $\epsilon_k^0 = \epsilon_k - \mu - Gv_k^2$  se obtienen finalmente las ecuaciones las ecuaciones:

$$2\epsilon_k^0 v_k u_k + \Delta_{BCS} (v_k^2 - u_k^2) = 0 \quad (4.12)$$

Estas son las ecuaciones BCS, su solución determina las cantidades  $u_k, v_k$  y por tanto el estado BCS  $|BCS\rangle$  mediante el Ansatz (4.2).

La solución a estas ecuaciones está dada por las expresiones

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\epsilon_k^0}{\sqrt{(\epsilon_k^0)^2 + \Delta^2}} \right) \quad u_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\epsilon_k^0}{\sqrt{(\epsilon_k^0)^2 + \Delta^2}} \right) \quad (4.13)$$

Notemos que esta solución depende de los parámetros  $\Delta$  y  $\mu$ , en especial el *gap*  $\Delta$  depende a su vez de las incógnitas  $u_k, v_k$  es decir, se trata ecuaciones no lineales. Introduciendo las definiciones anteriores para  $u_k, v_k$  en la definición del *gap* (4.11) obtenemos:

$$\Delta = G \sum_k u_k v_k = \frac{G}{2} \sum_k \frac{\Delta}{\sqrt{(\epsilon_k^0)^2 + \Delta^2}} \quad (4.14)$$

Esta ecuación es la llamada *ecuación del gap*, y en general requiere encontrar su solución numéricamente. Únicamente falta por implementar la condición (4.6) para determinar el potencial químico  $\mu$ ,

$$2n_0 = \langle BCS | \hat{H} | BCS \rangle = 2 \sum_k v_k^2 \quad (4.15)$$

Diremos aquí de forma general que las ecuaciones (4.14)-(4.15) tienen que ser resueltas numéricamente de forma iterativa.

En el límite termodinámico  $d/\tilde{\Delta} \rightarrow 0$  que es reproducido analíticamente en el apéndice A, la ecuación del *gap* (4.14) se reduce a la ecuación estándar BCS 4.2.

### 4.3.2. Ecuaciones BCS en para el sistema impar

Cuando el sistema contiene un número impar ( $p = 1$ ) de partículas las ecuaciones BCS deben ser modificadas.

El anstaz BCS en esta situación está dado por  $|BCS\rangle_i$  (4.2). La partícula que está desapareada se sitúa en el nivel  $j$ , el cual a través del principio de Pauli inhibe su participación en el proceso de interacción entre pares. Se dice entonces que el nivel  $j$  está *bloqueado*, pues siempre se encuentra ocupado. De esta forma a la función de onda que representa  $|BCS\rangle_i$

$$|BCS\rangle_i = c_j^\dagger \prod_{k \neq j} (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \quad (4.16)$$

se le llama función de onda bloqueada. Esta misma función es utilizada para encontrar las ecuaciones BCS para el sistema impar, usando igualmente el principio variacional, encontrando prácticamente las mismas ecuaciones para las amplitudes  $v_k^2$  que antes.

## 4 *Desarrollos en teorías de muchos cuerpos para sistemas superconductores finitos*

---

La diferencia reside en que en las expresiones de la sección anterior no aparece el nivel bloqueado  $j$ , así por ejemplo el gap se transforma en

$$\Delta = G \sum_{k \neq j} u_k v_k \quad (4.17)$$

Es decir el nivel bloqueado  $j$  queda excluido de la suma y no contribuye a la energía de apareamiento.

Exactamente igual sucede para la ecuación que determina el potencial químico (4.15), que pasa ahora a ser

$$N = 1 + 2 \sum_{k \neq j} v_k^2 \quad (4.18)$$

y para la energía total tendremos

$$E_{p=1} = 2 \sum_{k \neq j} (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - G \left( \sum_{k \neq j} u_k v_k \right)^2 - G \sum_{k \neq j} v_k^4 + \epsilon_j \quad (4.19)$$

Como vemos el efecto del nivel bloqueado  $j$  contribuye exclusivamente a la energía con el término cinético  $\epsilon_j$ .

### 4.4 **Discusión cualitativa**

Antes de analizar los resultados numéricos que se obtienen al resolver las ecuaciones BCS para el modelo propuesto, describiremos cualitativamente lo que se espera obtener.

La ecuación del gap (4.14) está formada por una suma discreta, esto hará que la evolución de  $\Delta$  sea decreciente conforme el espaciado  $d$  aumente. La razón de este comportamiento reside en que un aumento en el espaciado entre niveles  $d$  implica un decremento en el número de pares con mezcla de apareamiento.

Aproximadamente este número se le considera el número de pares de Cooper del sistema. Como en el régimen  $d \gg \tilde{\Delta}$  ningún par está en el régimen correlacionado  $|\epsilon_k - \epsilon_F| < \tilde{\Delta}$  que es donde sucede la mezcla entre pares. En consecuencia  $\Delta$  será cero en ese límite y en general  $\Delta(d)$  será una función decreciente de  $d$ , llegando a anularse cuando  $d \cong \tilde{\Delta}$ .

El valor del gap para el caso impar será más pequeño que para el caso par como función del espaciado  $d$ . En el caso impar hay un par de partículas menos que en el sistema par y por tanto menos pares correlacionados, en consecuencia  $\Delta$  será menor. Éste es la manifestación obvia del efecto de bloqueo [Sol61], muy conocido en el ámbito de la física nuclear: los estados que están ocupados por una sólo partícula no pueden tomar parte en la interacción de pares. El efecto del

bloqueo es más acusado conforme aumenta el espaciado  $d$ , es todavía más intenso cuando el estado bloqueado está más cerca del nivel de Fermi  $\epsilon_F$ .

Con los argumentos expuestos anteriormente se espera que el *gap*  $\Delta$  dependa fuertemente de la paridad del sistema y que para el caso en el que  $d \cong \tilde{\Delta}$  también lo haga. Todos estos razonamientos hacen presuponer que el tratamiento convencional de campo medio BCS resulta insuficiente.

## 4.5 Solución numérica

Es posible resolver numéricamente la ecuación del *gap* (4.14) en los límites  $d \ll \tilde{\Delta}$  y  $d \gg \tilde{\Delta}$  (ver apéndice A), pero en general el conjunto de ecuaciones (4.14) y (4.15) tienen que ser resueltas numéricamente. Para hacerlo es necesario fijar los valores de los parámetros que fijan el modelo.

Las energías se medirán en unidades del *gap* correspondiente al sistema infinito  $\tilde{\Delta}$  el cual se define como  $\tilde{\Delta} = \omega_D \sinh(1/\lambda)$ . Obviamente el valor experimental para esta cantidad diferirá con respecto al de un sistema infinito [STKC70a, GBM68]. Experimentalmente se encuentra que el valor para  $\tilde{\Delta}$  en los granos de Aluminio es aproximadamente el doble que en una muestra grande. Para capas delgadas de Aluminio se encuentra [MTF70]  $\tilde{\Delta} = 0.38$  meV que será el valor utilizado en nuestras aplicaciones numéricas. Tomando la frecuencia de Debye como  $\omega_D = 34$  meV usaremos  $\lambda = [\sinh^{-1}(\omega_D/\tilde{\Delta})]^{-1} = 0.224$  como valor para el parámetro de interacción de apareamiento. En cualquier caso el valor concreto de la constante  $\lambda$  no es muy importante, pues si las energías son expresadas en unidades de  $\tilde{\Delta}$  toda la dependencia de  $\lambda$  queda absorbida en  $\tilde{\Delta}$ .





# **SUPERCONDUCTIVIDAD EN EL SISTEMA CANÓNICO. TEORÍA PROYECTADA.**

## **5.1 Introducción**

Desde los primeros días de la teoría BCS el Ansatz variacional para el estado fundamental (4.2) fue rápidamente aceptado y en sus aplicaciones tuvo mucho éxito, a pesar de que en el propio trabajo de Bardeen, Cooper y Schrieffer [BCS57] ya enfatizaron que el verdadero estado fundamental de un superconductor aislado debe ser un estado con un número definido de electrones.

El éxito de la teoría BCS se debe fundamentalmente a dos razones. La primera de ellas es obvia, desde el punto de vista del cálculo resulta ser muy sencilla. Determinar los parámetros variacionales ( $u_k, v_k$ ) es muchísimo más simple en el sistema gran canónico que en el canónico. La segunda razón consiste en que se obtienen resultados exactos en el límite termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ). Se puede demostrar que la proyección del número de partículas corrige la energía por electrón al orden  $N^{-1}$ , como demuestra Anderson en [And58] y Muhlschlegel [Muh62].

Sin embargo a la luz de los experimentos realizados por Ralph, Black y Tinkham [RBT97] el rango de validez de la teoría BCS debe ser revisada. Como vimos en el capítulo 2 la energía de carga es mucho más grande que el gap del sistema infinito  $\tilde{\Delta}$ ,  $E_C \gg \tilde{\Delta}$  de forma que las fluctuaciones en el número de partículas están fuertemente suprimidas y en consecuencia se necesita una descripción canónica. Además el espaciado entre niveles  $d$  es comparable con  $\tilde{\Delta}$ , es decir que el sistema se encuentra entre el régimen dominado por fluctuaciones  $d \gg \tilde{\Delta}$  (pocos electrones) y el régimen del sistema infinito  $d \ll \tilde{\Delta}$ .

En esta parte de la tesis nos centramos en la formulación de la teoría canónica que aplicaremos en los granos superconductores, es decir, en la recuperación de la simetría del número de partículas. Lo haremos usando la técnica de la proyección descrita en 3.4 que es ampliamente usada en la literatura de física nuclear. En concreto el método usado se basa en el trabajo desarrollado por K. Dietrich, H. J. Mang y J. H. Pradal [DMP64]. Existen otras formulaciones alternativas a la que seguiremos aquí como la que se presenta en [DS99].

## 5.2 El método BCS proyectado

El método de la proyección BCS es llamado en la literatura PBCS (*Projected BCS*) y nos referiremos a él de este modo. En la literatura ha sido extensamente utilizado no sólo en la física nuclear sino también en modelos de superconductividad disitintos a los usados en esta tesis, ver por ejemplo la aplicación de Tanaka y F. Marsiglio [TM].

El método PBCS tiene en cuenta las peculiaridades del Ansatz BCS y toma ventaja de ellas. Al mismo tiempo asegura la conservación del número de partículas. Esto último se consigue proyectando un estado descrito por la teoría BCS sobre el espacio de Hilbert con el número de partículas correcto. Es posible realizar esta operación mediante dos caminos distintos (ver 3.4), a saber: se puede encontrar primero los parámetros variacionales  $(u_k, v_k)$  del estado BCS y entonces proyectarlo al espacio de Hilbert con el número de partículas requerido. A esta forma de proyectar se le llamó PAV (*projection after variation*) en el capítulo 3.4. Hagamos notar que este método no es un método estrictamente variacional. Una mejor alternativa es la otra posibilidad, primero proyectar y después encontrar los parámetros variacionales. Este segundo procedimiento es el llamado VAP (*variation after projection*) en el capítulo 3.4. Obviamente el método VAP es el que está de acuerdo con el principio variacional, y en general con él se obtendrán mejores resultados.

En términos generales el método PBCS es una aproximación que debe funcionar correctamente otorgando buenos resultados en los regímenes de pocos electrones y por supuesto en límite termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ) pero no tiene por que ser esto cierto en la región intermedia, como tendremos oportunidad de comprobar más adelante.

## 5.3 El modelo

De nuevo usaremos en nuestras aplicaciones el sistema formado por el grano superconductor por el hamiltoniano BCS reducido 4.1 que fue usado en el capítulo anterior.

$$H = \sum_{k, \sigma = \pm} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - G \sum_{k, k'} c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+} \quad (5.1)$$

Notemos que ahora  $\mu = 0$  pues en una teoría canónica el potencial químico no es necesario. Los operadores  $c_{k\pm}^\dagger$  crean electrones en estados  $|k, \pm\rangle$  que son inverso temporales unos de los otros, cuyas energías vienen dadas por  $\epsilon_k = kd$ . La constante de interacción  $G$  se escribe como  $G = \lambda d$  siendo  $\lambda$  una constante sin dimensiones y  $d$  es espaciado medio entre niveles. La constante  $\lambda$  está relacionada con los parámetros del sistema  $\tilde{\Delta}$  (el gap del sistema infinito) y  $\omega_D$  (la frecuencia de Debye) a través de la ecuación del gap en el límite termodinámico  $\sinh(1/\lambda) = \omega_D/\tilde{\Delta}$ . Elegimos  $\lambda = 0.224$ , que está cercano al Aluminio. El espaciado de niveles  $d$  determina el número  $N = 2\omega_d/d$  de niveles, escogidos simétricamente alrededor de  $\epsilon_F$ .

## 5.4 La teoría PBCS

Como vimos en el capítulo anterior, la teoría BCS no conserva el número de partículas, es decir, el estado  $|BCS\rangle$ , no es autoestado del operador número de partículas  $\hat{N}$ . En una base de autoestados del operador  $\hat{N}$ , el estado BCS se podrá descomponer de la forma siguiente:

$$|BCS\rangle = \sum_N c_N |BCS\rangle_N, \quad (5.2)$$

siendo  $c_N$  los coeficientes de la expansión en esa base, que en general no son nulos.

Pasemos ahora a encontrar el autoestado con buen número de partículas que sustituye a 4.2 en la teoría proyectada. Por ahora nos restringimos al caso con un número par de partículas. Como hemos mencionado más arriba es necesario proyectar sobre el subespacio generado por  $|BCS\rangle_N$ , es decir

$$|BCS\rangle_N = \hat{P}^N |BCS\rangle \quad (5.3)$$

El proyector  $\hat{P}^N$  es un operador integral cuya expresión es [RS80]:

$$\hat{P}^N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{i\phi(\hat{N}-N)} \quad (5.4)$$

y satisface las siguientes igualdades

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{P}^N] &= 0 \\ \hat{P}^{N\dagger} &= \hat{P}^N \\ \hat{P}^N \cdot \hat{P}^N &= \hat{P}^N \end{aligned} \quad (5.5)$$

Pasemos ahora a calcular la forma que posee el estado con un buen número de partículas para el caso par. Para conseguir esto es necesario actuar con el proyector  $P^N$  sobre el estado  $|BCS\rangle$

$$|BCS\rangle_N = \hat{P}^N |BCS\rangle \quad (5.6)$$

Escribiendo este estado en detalle

$$\begin{aligned} |BCS\rangle_N &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{i\phi(\hat{N}-N)} \prod_k (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i\phi N} \prod_k (u_k + e^{i\phi\hat{N}} v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \end{aligned} \quad (5.7)$$

Teniendo ahora en cuenta la igualdad

$$e^{i\phi\hat{N}} a_k^\dagger e^{-i\phi\hat{N}} = e^{i\phi} a_k^\dagger \quad (5.8)$$

se obtiene

$$|BCS\rangle_N = C \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i\phi n_0} \prod_k (u_k + e^{i\phi} v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \quad (5.9)$$

Siendo  $n_0$  el número de pares del sistema ( $n_0 = N/2$ ). La integral sobre  $\phi$  es la que realiza la proyección y por tanto asegura la conservación del número de partículas. La constante  $C$  es la constante de normalización para que se cumpla  $\langle BCS | BCS \rangle_N = 1$ . Además las amplitudes ( $u_k, v_k$ ) deben ser elegidas de tal forma que satisfagan  $u_k^2 + v_k^2 = 1$ . Hagamos notar ahora una característica importante dentro de la teoría PBCS. Como sabemos, en la teoría usual BCS la magnitud  $v_k^2$  es la probabilidad de encontrar el par de estados  $k+, k-$  ocupados, y  $u_k^2$  es la probabilidad de encontrarlos vacíos. Pues bien, esto no es cierto en la teoría proyectada como veremos más adelante.

Es posible realizar la integral en (5.9) analíticamente [TM]. El resultado es una suma sobre todos los productos que aparecen en (5.9) los cuales contienen exactamente  $N/2$  factores de  $v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger$ . Este número de términos es prohibitivo para incluso un número moderado de pares  $n_0$  implicando que aún existiendo una forma exacta de calcular la integral de proyección no puede evaluarse. Existen alternativas para evaluar numéricamente de forma asequible la integral de proyección. Una posibilidad es realizar la famosa expansión de Fomenko [RS80] ampliamente utilizada en aplicaciones a los sistemas nucleares, otra consiste en realizar un desarrollo de la integral en  $1/n_0$  como propuso Kawabata en [Kaw81], sin embargo nosotros optaremos por evaluar las integrales numéricamente mediante la técnica del método de la transformada rápida de Fourier, como será explicado más adelante.

### 5.5 Integrales de residuo

A partir de ahora es necesario introducir unos objetos que serán fundamentales dentro de la teoría proyectada. A través de las cuales podremos expresar los valores esperados en esta teoría.

Estos objetos son las llamadas *integrales de residuo* y se definen como:

$$R_n^{j_1, \dots, j_M} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i(n_0-n)\phi} \prod_{k \neq j_1, \dots, j_M} (u_k^2 + e^{i\phi} v_k^2). \quad (5.10)$$

También pueden ser expresadas mediante integrales en el plano complejo:

$$R_n^{j_1, \dots, j_M} = \frac{1}{2\pi i} \oint dz z^{-(n_0-n)} \prod_{k \neq j_1, \dots, j_M} (u_k^2 + z v_k^2). \quad (5.11)$$

Donde la integral se extiende sobre un camino cerrado centrado en el origen. Sin embargo usaremos en la formulación de la teoría y en los propósitos numéricos la expresión (5.10).

Los  $M$  estados listados en los paréntesis son aquellos que son excluidos del producto  $\prod_k (u_k^2 + z v_k^2)$ . Para  $M = 0$  el producto contiene  $N$  factores diferentes  $\prod_k (u_k^2 + z v_k^2)$ . Por definición todas aquellas integrales de residuo que contengan un par de índices iguales se hacen idénticamente nulas.

Las integrales de residuo satisfacen algunas propiedades matemáticas muy útiles que resumimos a continuación.

La más importante de ellas son las llamadas relaciones de recurrencia encontradas por Dietrich *et al* [DMP64], y que se obtienen directamente de la definición (5.10)

$$\begin{aligned}
 R_n^{j_1, \dots, j_M} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i(n_0-n)\phi} \prod_{k \neq j_1, \dots, j_M} (u_k^2 + e^{i\phi} v_k^2) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i(n_0-n)\phi} (u_l^2 + e^{i\phi} v_l^2) \prod_{k \neq j_1, \dots, j_M, l} (u_k^2 + v_k^2) \\
 &= u_l^2 R_n^{j_1, \dots, j_M, l} + v_l^2 R_{n+1}^{j_1, \dots, j_M, l}
 \end{aligned} \tag{5.12}$$

Esta igualdad permite el cálculo de una integral de residuo a partir de conocer otras dos, de modo que tiene inmensa utilidad para el cálculo de las integrales de residuo. Desde otro punto de vista, las relaciones de recurrencia (5.12) pueden entenderse como condición de normalización, en efecto, cuando son evaluadas en el límite de la teoría BCS todas las integrales de residuo se reducen a la unidad y las relaciones de recurrencia (5.12) devienen en la condición de normalización usual  $u_k^2 + v_k^2 = 1$ . Desde esta observación también se desprende que todas las integrales de residuo están comprendidas entre los valores 0 y 1.

Los valores esperados en la teoría proyectada quedan expresados a través de las integrales de residuo, como ilustración podemos calcular la probabilidad de que un par de estados  $(k+, k-)$  esté ocupado por dos electrones:

$$\langle BCS | (c_{k+} c_{k-})^\dagger c_{k+} c_{k-} | BCS \rangle_N = v_k^2 \frac{R_1^k}{R_0^0} \tag{5.13}$$

y la probabilidad de que no estén ocupados está dada por:

$$1 - \langle BCS | (c_{k+} c_{k-})^\dagger c_{k+} c_{k-} | BCS \rangle_N = u_k^2 \frac{R_0^1}{R_0^0} \tag{5.14}$$

Estas expresiones tienen un significado importante, como vemos en la teoría proyectada las cantidades  $u_k^2$  y  $v_k^2$  no tienen el significado de probabilidades de ocupación como ocurría en la teoría BCS sino que aparecen moduladas por las integrales de residuo. Desde este punto de vista la ocupación de un nivel depende de las ocupaciones del resto de los niveles a través de las

integrales de residuo. En otras muchas magnitudes la presencia de las integrales juega el mismo papel. Con esto podemos inferir que las integrales de residuo son las responsables de tratar más adecuadamente las correlaciones entre partículas que en la aproximación BCS.

### 5.6 La energía proyectada

Una de las ventajas de usar el formalismo de las integrales de residuo en la teoría proyectada es que los valores esperados en esta teoría pueden ser obtenidos a partir de los de la teoría BCS con la simple introducción adecuada de las integrales de residuo, sin necesidad de calcular explícitamente dichos valores medios (como veremos a continuación para el caso de la energía). En otras palabras, la formulación de la teoría proyectada usando el método de las integrales de residuo transcurre en forma paralela a la de BCS.

Pasemos ahora al cálculo de la expresión de la energía dentro de la teoría proyectada

$$E_P = \frac{\langle BCS | \hat{H} | BCS \rangle_N}{\langle BCS | BCS \rangle_N} \quad (5.15)$$

El cálculo de cada uno de los elementos de matriz que contribuyen en esta expresión está realizado con todo detalle en el apéndice B. La expresión final es la siguiente:

$$E_N = 2 \sum_j \left( \epsilon_j - \frac{G}{2} \right) v_j^2 \frac{R_1^j}{R_0^0} - G \sum_{jk} u_j v_j u_k v_k \frac{R_1^{jk}}{R_0^0} \quad (5.16)$$

La energía proyectada posee una peculiaridad que no cumple su análogo en la teoría BCS. Las amplitudes  $u_k, v_k$  no determinan por completo la energía proyectada, en efecto, la transformación:

$$\bar{v}_k = \frac{\beta v_k}{(u_k^2 + \beta^2 v_k^2)^{1/2}} \quad \bar{u}_k = \frac{u_k}{(u_k^2 + \beta^2 v_k^2)^{1/2}} \quad (5.17)$$

deja invariante la energía (5.16) y otras cantidades como las probabilidades de ocupación. Esta ambigüedad no existe en la teoría BCS. La razón reside en la estructura del estado proyectado  $|BCS\rangle_N$ , la transformación  $e^{i\alpha\hat{N}}|BCS\rangle_N$  conduce a un estado proporcional al anterior, es decir

$$e^{i\alpha\hat{N}}|BCS\rangle_N \propto |BCS\rangle_N \quad (5.18)$$

Esta transformación se entiende como una rotación en el espacio *gauge*  $N$  con ángulo  $\alpha$  dejando invariante la energía.

Más adelante veremos cómo usar esta arbitrariedad en provecho de las aplicación numérica.

## 5.7 Ecuaciones variacionales

Como sabemos, el principio variacional determina las cantidades  $u_k, v_k$ . Al igual que en la teoría BCS el principio toma la forma matemática siguiente:

$$\delta \langle BCS | \hat{H} | BCS \rangle_N = 0 \quad (5.19)$$

La minimización se realiza respecto del parámetro  $v_k$ . Esto da lugar al siguiente conjunto de  $N$  ecuaciones (ver la sección B.2 del apéndice B para los detalles en los cálculos)

$$(\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k) u_k v_k = \Delta_k (u_k^2 - v_k^2) \quad (5.20)$$

Donde el conjunto de cantidades  $\epsilon_k, \Delta_k, \Lambda_k$  se define de la forma siguiente:

$$\hat{\epsilon}_k = \left( \epsilon_k - \frac{G}{2} \right) \frac{R_1^k}{R_0^0} \quad (5.21)$$

$$\Delta_k = \frac{G}{2} \sum_j u_j v_j \frac{R_1^{jk}}{R_0^0} \quad (5.22)$$

$$\Lambda_k = \sum_j \left( \epsilon_k - \frac{G}{2} \right) v_j^2 \left( \frac{R_2^{jk} - R_1^{jk}}{R_0^0} - \frac{R_1^j R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) - \frac{G}{2} \sum_{kl} u_j v_j u_l v_l \left( \frac{R_2^{jkl} - R_1^{jkl}}{R_0^0} - \frac{R_1^j R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right). \quad (5.23)$$

El conjunto de ecuaciones (5.20) recuerdan las ecuaciones BCS ordinarias (4.12), para las cuales  $\Lambda_k = 0$  y  $\hat{\epsilon}_k = \epsilon_k - Gv_k^2 - \mu$ . Notemos que en las ecuaciones proyectadas el campo  $\Lambda_k$  aparece en adición con respecto a las ecuaciones BCS.

Resolviendo estas ecuaciones numéricamente obtenemos una cota superior para la energía del estado fundamental, la forma de hacerlo se detalla en el apéndice B, en concreto en B.5. El caso para un número impar de partículas se analiza en el B.23.

En el límite  $d \rightarrow 0$  cuando el producto  $n_0 d$  es constante la teoría proyectada se reduce a la teoría BCS, esto sucede cuando las fluctuaciones en el número de partículas son despreciables.

En esta situación las integrales de residuo se hacen iguales (pues pueden ser aproximadas en este caso por sus valores de ensilladura  $\phi = 0$  [DMP64]). En consecuencia el campo  $\Lambda_k$  se anula idénticamente. Las ecuaciones variacionales (5.20) se desacoplan y se reducen a la ecuación del *gap* ordinaria.

En el límite opuesto  $d \gg \tilde{\Delta}$  donde el número de pares  $n_0$  es pequeño, es decir estamos en el régimen dominado por fluctuaciones en el número de partículas, se hace necesario encontrar la solución exacta para poder comparar con los resultados de la proyección. Estas comparaciones serán

realizadas más adelante. Adelantando resultados diremos aquí que se encuentra un acuerdo muy bueno entre las predicciones para la energía según la proyección y la teoría exacta, alrededor del 6 % para un número de pares  $n_0 = 10$ . Este resultado muestra que las fluctuaciones superconductoras son tratadas de forma satisfactoria por la teoría proyectada en esta región.

En principio parece claro que si la teoría proyectada funciona para ambos regímenes  $d \ll \tilde{\Delta}$  y  $d \gg \tilde{\Delta}$  es razonable confiar que en el régimen intermedio o de transición  $d \sim \tilde{\Delta}$  también lo hará, a pesar de que no podemos cuantificar el error cometido sin realizar los cálculos. En los capítulos siguientes veremos sin embargo cómo la teoría proyectada no contiene las correlaciones necesarias para describir correctamente dicha transición, así como otras magnitudes que caracterizan las correlaciones y cómo la teoría que nosotros proponemos en esta tesis remedia este problema.



## LA SOLUCIÓN EXACTA DE RICHARDSON

### 6.1 Introducción

Richardson y Sherman mostraron en el año 1964 [RS64] que los autoestados y sus correspondientes energías del hamiltoniano de apareamiento 5.1 pueden obtenerse *exactamente* para un conjunto no degenerado de energías de partícula  $\epsilon_k$ . Esto es posible, como demostraron Richardson y Sherman resolviendo un conjunto de ecuaciones algebraicas acopladas, tantas como pares de partículas tiene el sistema.

El trabajo de Richardson fue pasado por alto y olvidado por la comunidad científica hasta que en 1998 fue recuperada por F. Braun y J. Von Delft [BvD99b] y por J. Dukelsky y G. Sierra [DS99] en sus aplicaciones en los granos superconductores a partir de las propias indicaciones de Richardson.

En este capítulo discutimos brevemente la esencia del método de Richardson que permite resolver el hamiltoniano (5.1). Más adelante veremos como el método de Richardson puede extenderse a hamiltonianos de apareamiento más generales que el que nos está ocupando hasta ahora.

### 6.2 El método de Richardson

Incluso Bardeen, Cooper y Schrieffer objetaron en su trabajo [BCS57] que si la interacción del hamiltoniano ([?]) es atractiva, entonces evidentemente el estado fundamental del sistema no tendrá ningún estado  $|k\pm\rangle$  ocupado por un único electrón. En términos del efecto de bloqueo este argumento puede ser generalizado, como los niveles bloqueados no participan en la dinámica generada por la interacción éstos pueden ser eliminados del modelo. De esta manera el sistema tendrá autoestados en los cuales ninguno de los restantes niveles sin bloquear estará ocupado por un único electrón.

Richardson obtiene provecho de esta situación introduciendo operadores de pares de electrones  $b_k = c_k - c_{k+}$ , y explota el hecho de que en el espacio de Hilbert formado por los estados que no están ocupados por electrones individuales el hamiltoniano modificado

$$\bar{H} = \sum_k 2\epsilon_k b_k^\dagger b_k - G \sum_{kk'} b_k^\dagger b_{k'} \quad (6.1)$$

es equivalente al de (5.1). En efecto, mientras que los términos de la interacción son ambos idénticos, el término cinético de (6.1) cuenta pares de electrones en lugar de electrones individuales como ocurre en (4.1). Como  $\bar{H}$  es cuadrático en los operadores  $b_k$ 's en principio podrían representar bosones. Sin embargo, consisten en dos electrones satisfaciendo el principio de Pauli, no se comportan como bosones auténticos, sino que satisfacen una identidad más restrictiva

$$[b_k, b_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'} (1 - 2b_k^\dagger b_k). \quad (6.2)$$

En el trabajo original de Bardeen, Cooper y Schieffer [BCS57] se llegó a la siguiente conclusión .<sup>el</sup> hamiltoniano modificado es cuadrático en los operadores  $b_k$ 's uno debería esperar encontrar una solución exacta para el estado fundamental mediante una apropiada redefinición de los estados de partícula individual, como puede ser realizado por las estadísticas de Fermi-Dirac o Bose-Einstein. Nuestros pares no parecen obedecer ninguna de estas, y por tanto una solución simple no parece posible".

Este juicio no parece correcto pues Richardson dio un método sencillo y directo para resolver el hamiltoniano cuadrático y mostró que todos los cálculos son tratables para  $T = 0$ .

El punto de partida de Richardson fue expresar un estado general del sistema  $|\Phi\rangle$  como:

$$|\Phi\rangle = \sum_{k_1 \neq \dots \neq k_{n_0}} \varphi(k_1 \dots k_{n_0}) b_{k_1}^\dagger \dots b_{k_{n_0}}^\dagger |-\rangle \quad (6.3)$$

donde la suma queda restringida a excluir la ocupación doble de los estados de pares electrónicos.

La función de onda  $\varphi$  se debe encontrar resolviendo la ecuación de Schrödinger como se detalla en el apéndice E.2.

Richardson mostró que el siguiente Ansatz con  $n_0$  parámetros  $e_k$  ( $k = 1 \dots n_0$ ) funciona de forma eficaz

$$\varphi(k_1 \dots k_{n_0}) \propto \sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P} \left\{ \prod_{j=1}^{n_0} \frac{1}{2\epsilon_{k_j} - e_{p(j)}} \right\} \quad (6.4)$$

Aquí  $\sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P}$  representa la suma sobre todas las permutaciones de los enteros  $1, \dots, n_0$ , y los parámetros  $e_k$  son las soluciones del conjunto de ecuaciones algebraicas llamadas *ecuaciones de Richardson*

$$\frac{1}{G} + \sum_{l=1, l \neq k}^{n_0} \frac{2}{e_l - e_k} = \sum_{j=1}^{2n_0} \sum_{j=1}^{2n_0} \frac{1}{2\epsilon_j - e_k}, \quad k = 1 \dots n_0 \quad (6.5)$$

La energía total del estado fundamental para el sistema con un número par de electrones está dada por

$$E_{exacta} = \sum_{k=1}^{n_0} e_k, \quad (6.6)$$

siendo el conjunto  $e_k$  aquellos que proporcionen la menor energía. Un poco más adelante aclararemos el significado físico de estos parámetros. En general las soluciones  $e_k$  son complejas [RS64] y por razones de simetría aparecen en pares complejo conjugados, asegurando que la energía total  $E_{exacta}$  sea real.

Una vez que los parámetros  $e_k$  son encontrados, la función de onda es conocida (salvo el factor de normalización) a través de la ecuación (6.4).

En general no nos ocuparemos de conocer explícitamente dichas funciones sino que nos preocuparemos por ciertos valores esperados que cuantifican aspectos de las correlaciones en el sistema. Una de estas cantidades son los correladores definidos como

$$C_k^2 = \langle c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle - \langle c_{k+}^\dagger c_{k+} \rangle \langle c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle, \quad (6.7)$$

que en términos de los operadores del hamiltoniano modificado son expresados por:

$$C_k^2 = \langle b_k^\dagger b_k \rangle - \langle b_k^\dagger b_k \rangle^2 = n_k - n_k^2, \quad (6.8)$$

donde  $n_k = \langle \Phi | b_k^\dagger b_k | \Phi \rangle$  es la probabilidad de ocupación de un estado de pares. Los correladores pueden ser fácilmente comparados con el resultado de la aproximación BCS y la teoría proyectada, pues su definición es independiente de la teoría usada.

Richardson mostró en [Ric65, Ric66] que los  $n_k$ 's necesarios para expresar los correladores pueden ser escritos como

$$n_k = \sum_{l=1}^{n_0} \frac{a_l}{(2\epsilon_k - e_l)^2} \quad (6.9)$$

con  $a_i$  siendo la solución de un sistema de ecuaciones lineales de dimensión  $n_0 \times n_0$

$$\left[ \sum_j \frac{1}{(2\epsilon_j - e_k)^2} - 2 \sum_{l=1, l \neq k}^{n_0} \frac{1}{(e_l - e_k)^2} \right] a_k + 2 \sum_{l=1, l \neq k}^{n_0} \frac{a_l}{(e_l - e_k)^2} = 1 \quad (6.10)$$

Comparado con la resolución del sistema (E.17) para encontrar los parámetros  $e_k$ , la solución del sistema lineal anterior es numéricamente trivial y los  $n_k$  pueden ser encontrados convenientemente por el método anterior.

Pasemos ahora a esclarecer el significado de las incógnitas  $e_k$ . Formalmente, como Richardson mostró en [Ric77], la solución de las ecuaciones (E.17), es decir, los  $e_k$  pueden ser mapeados sobre

un problema electrostático en dos dimensiones. En esta analogía las soluciones  $e_k$  son los lugares de  $n_0$  cargas libres en el plano complejo. Las ecuaciones (E.17) representan las configuraciones de equilibrio que alcanzan estas cargas bajo la influencia de un campo uniforme externo de intensidad  $-G$  y un campo de cargas fijas situadas sobre  $2\epsilon_j$  en el eje  $x$ . Explotando esta analogía y la expansión multipolar del campo eléctrico asociado con la distribución de cargas, Richardson encontró que en el límite termodinámico  $n_0 \rightarrow \infty$  a  $n_0 d$  las ecuaciones (E.17) conducen a la ecuación del *gap* en la teoría BCS y la energía exacta  $E_{exacta}$  (6.6) reproduce la energía BCS.

Para sistemas finitos, las cantidades  $e_k$  tienen que ser resueltas numéricamente resolviendo el sistema acoplado (E.17). Dicha solución numérica es algo complicada por el hecho de que las ecuaciones de Richardson son singulares para distintos valores en la interacción  $G$ , para los cuales dos de las  $e_k$  se vuelven iguales a  $\epsilon_k$ . El mismo Richardson propuso en [Ric66] una transformación para desprenderse de los puntos singulares y regularizar así las ecuaciones. Para propósitos numéricos usamos la transformación sugerida por Richardson como se explica en E.3.

## EL MÉTODO DE LA COORDENADA GENERADORA

### 7.1 Introducción

Hasta ahora, en los capítulos precedentes hemos desarrollado dos aproximaciones (teorías BCS y PBCS) para tratar la naturaleza de la superconductividad. Dichas aproximaciones están basadas en escribir el estado general del sistema como una función de onda producto para poder incluir las máximas correlaciones posibles. Sin embargo, usando este esquema es posible añadir más correlaciones con la esperanza de que se mejoren los resultados ofrecidos por la teoría BCS y por la proyección al número de partículas.

Con este objetivo en mente, en este capítulo desarrollaremos la teoría del *método de la coordenada generadora* (MCG) y plantaremos su aplicación en los granos superconductores.

El método de la coordenada generadora es un método cuántico completamente general basado en construir un estado basado en una superposición lineal de estados producto diferentes. El método fue propuesto originalmente por Hill, Wheeler y Griffin [HW53, GW57, Gri57].

El MCG puede ser usado en diversidad de problemas. Su origen reside en la física nuclear, sus primeras aplicaciones trataron problemas como las vibraciones armónicas en núcleos o procesos de fisión donde la dinámica colectiva juega un papel esencial. Otras aplicaciones pioneras representativas son las aplicaciones a los *clusters* [WM66, BW68] nucleares, y a la dispersión de partículas compuestas sobre núcleos [Fli72, BBBM75].

Desde el punto de vista teórico uno de los mayores logros que ha conseguido el MCG en la teoría del movimiento colectivo es que se puede derivar desde un tratamiento cuántico un Hamiltoniano colectivo que provee una conexión microscópica a los modelos colectivos clásicos [RS80].

Expondremos ahora a modo de introducción la idea fundamental que está detrás del método de la coordenada generadora.

Antes de nada es necesario comenzar por la elección de un conjunto de estados  $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$ , los cuales dependen paramétricamente de uno o más grados de libertad colectivos  $\{\mathbf{q}\} = q_1, q_2, \dots, q_N$ , éstas son las llamadas *coordenadas generadoras*.

En la física nuclear uno de los ejemplos más representativos como coordenada generadora es

la deformación cuadrupolar ( $q_{20}$ ) e incluso parámetros que identifiquen la orientación, la forma, el tamaño o la posición. Las correspondientes variaciones (mezcla de configuraciones) inducen cambios en los estados, de esta forma se podrá estudiar y describir cómo el sistema responde a la dinámica que representa dicha coordenada. Desde el punto de vista formal es un método variacional sencillo y sumamente flexible, incluso puede extenderse al caso de grados de libertad colectivos continuos.

Es importante notar desde el principio que la elección de la coordenada generadora es completamente libre y debe estar dictada por el problema a estudiar. Pero es necesario tener en cuenta que la elección lleva de forma implícita la suposición que los otros grados de libertad tienen el tiempo suficiente de relajarse por completo, en otras palabras, es necesario asegurarse que el grado de libertad escogido es el responsable del fenómeno que se está estudiando.

### 7.2 El Ansatz MCG. Ecuación de Hill-Wheeler

Como dijimos previamente en la introducción el MCG consiste en tomar como estado inicial una superposición de los estados generadores  $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$ . La superposición se obtiene variando los parámetros  $\{\mathbf{q}\}$ , que son las llamadas coordenadas generadoras, en virtud del movimiento colectivo que son responsables. Notemos que el nombre de coordenada es algo confuso, pues el conjunto de las  $\{\mathbf{q}\}$  no son en modo alguno coordenadas en el sentido matemático.

Dicho estado se representa matemáticamente mediante la siguiente integral:

$$|\Psi_\sigma\rangle = \int d\mathbf{q} f_\sigma(\mathbf{q}) |\Phi(\mathbf{q})\rangle. \quad (7.1)$$

Como vemos el conjunto  $\{\mathbf{q}\}$  juega el papel de un índice continuo sobre el que se realiza la integración.

A las funciones  $f_\sigma(\mathbf{q})$  realizan el papel de funciones peso y determinan por completo el comportamiento de las coordenadas  $\{\mathbf{q}\}$  en el estado  $|\Psi_\sigma\rangle$ . En realidad cuantifican la proporción de mezcla de cada uno de los estados  $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$ , aunque en sí mismo, las funciones  $f$  no tengan significado físico alguno como veremos más adelante. El subíndice  $\sigma$  etiqueta los distintos estados MCG que se obtendrán. Así por ejemplo, para  $\sigma = 0$  tenemos el estado fundamental y para  $\sigma = 1, 2, \dots$  el resto del espectro.

Recordemos que la formulación del método así planteado es completamente general y nada dice acerca de cuál debe ser la elección de los estados  $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$ , y en realidad puede ser cualquiera. En general podemos decir que en las aplicaciones en física nuclear y en la que realizamos en esta tesis está ligada con la construcción de estados correlacionados de muchos cuerpos, y en general son estados de tipo producto. Es una regla usual usar estados con deformaciones colectivas como pueden ser vibraciones de superficie, estados de fisión, difusión de iones pesados. La flexibilidad en escoger los estados generadores a veces trae el inconveniente de trabajar con bases no ortogonales.

Tratemos ahora el problema de encontrar las funciones  $f_\sigma(\mathbf{q})$  que como sabemos determinan el estado MCG  $|\Psi\rangle$ . Ante todo se asume que las funciones  $f$  se comportan bien con respecto a las variables  $\{\mathbf{q}\}$ , en especial se espera que sean funciones de cuadrado integrable, de tal forma que se puedan realizar las operaciones matemáticas que a continuación vamos a usar. Para un mayor detalle consultar [RS80] y las referencias allí facilitadas.

El MCG es un método variacional. En consecuencia las funciones  $f$  deben hallarse a partir del principio variacional de Ritz:

$$\delta \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0 \quad (7.2)$$

Realizando la variación con respecto a  $f(\mathbf{q})$  se obtiene la siguiente ecuación integral:

$$\int d\mathbf{q}' \langle \Phi(\mathbf{q}) | \hat{H} | \Phi(\mathbf{q}') \rangle f_\sigma(\mathbf{q}') = E_\sigma \int d\mathbf{q}' \langle \Phi(\mathbf{q}) | \Phi(\mathbf{q}') \rangle f(\mathbf{q}') \quad (7.3)$$

Esta expresión recibe el nombre de ecuación de Hill-Wheeler [HW53]. Simbólicamente en forma matricial puede escribirse como:

$$\mathcal{H}f = E\mathcal{N}f \quad (7.4)$$

donde las matrices  $\mathcal{N}$  y  $\mathcal{H}$  son los llamados *solapes de la norma* y *solape del hamiltoniano* respectivamente:

$$\mathcal{H}_{qq'} = \langle \Phi(\mathbf{q}) | \hat{H} | \Phi(\mathbf{q}') \rangle \quad (7.5)$$

$$\mathcal{N}_{qq'} = \langle \Phi(\mathbf{q}) | \Phi(\mathbf{q}') \rangle \quad (7.6)$$

Formalmente, la ecuación (7.4) puede verse como una diagonalización del hamiltoniano en la base no ortogonal  $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$ , es decir, que los estados generadores para distintos valores de  $\mathbf{q}$  no son ortonormales. Notemos que la ecuación (7.4) solamente puede tratarse como un problema de diagonalización en el caso de que el conjunto de las coordenadas generadoras sea finito. Precisamente, esta es la situación más común. En esta situación se tiene un número finito de estados  $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$  que en general son linealmente dependientes y en consecuencia la base formada por ellos no es completa.

Antes de indicar como obtener la solución a la ecuación de Hill-Wheeler indiquemos cual es la solución formal a dicha ecuación. Si se invierte la matriz del solape de la norma se llega a:

$$\mathcal{N}^{-1}\mathcal{H}f = Ef \quad (7.7)$$

Esta expresión es directamente una ecuación de autovalores, donde la matriz a diagonalizar es  $\mathcal{N}^{-1}\mathcal{H}$ , sin embargo esta matriz puede no ser hermítica, esto es así cuando la matriz  $\mathcal{N}$  tiene

autovalores no nulos. Por norma general este es el caso pues como hemos dicho la base de estados  $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$  es, en general, linealmente dependiente. La forma usual de resolver el problema es mediante el método de ortonormalización de Gram-Schmidt, que conduce a la descomposición de la matriz  $\mathcal{N}$  en dos matrices triangulares. Otro método posible es el llamado ortogonalización simétrica, el cual es el aplicable al caso continuo.

En esencia, la solución de la ecuación de Hill-Wheeler (7.4) consta de dos diagonalizaciones, la primera de ellas se realiza con la matriz  $\mathcal{N}$ . Esta primera diagonalización permite construir una base  $U_k(\mathbf{q})$  en la que se satisface

$$\int d\mathbf{q}' \mathcal{N}_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} U_k(\mathbf{q}') = n_k U_k(\mathbf{q}) \quad (7.8)$$

La base formada por  $U_k(\mathbf{q})$  está etiquetada por el índice discreto  $k = 1, \dots$  que a su vez etiqueta los autovalores  $n_k$ . Observemos que  $\mathcal{N}$  es una norma, de modo que sus autovalores no son nunca negativos  $n_k \geq 0$ .

En el caso que ocurra  $n_k = 0$ , esto corresponde a una norma nula para el estado asociado a este autovalor, lo que demuestra que en este caso las funciones son linealmente dependientes, y el subespacio con autovalores nulos debe ser omitido.

Las funciones  $U_k(\mathbf{q})$  forman un conjunto completo ortonormalizado en el espacio de las funciones  $f$  y satisfacen en consecuencia

$$\sum_k U_k(\mathbf{q}) U_k^*(\mathbf{q}') = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \quad \int d\mathbf{q} U_k^*(\mathbf{q}) U_{k'}(\mathbf{q}) = \delta_{kk'} \quad (7.9)$$

En el espacio de las  $U_k(\mathbf{q})$  la matriz  $\mathcal{N}$  puede ser descompuesta como  $\mathcal{N} = \mathcal{N}^{1/2} \mathcal{N}^{1/2}$  con

$$\mathcal{N}^{1/2}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \sum_k U_k(\mathbf{q}) \sqrt{n_k} U_k^*(\mathbf{q}'). \quad (7.10)$$

De esta forma se llega a un nuevo problema de autovalores

$$\mathcal{N}^{1/2} \mathcal{H} \mathcal{N}^{1/2} g = E g \quad (7.11)$$

donde las funciones originales quedan definidas a partir de  $f = \mathcal{N}^{-1/2} g$ .

La nueva ecuación de autovalores (7.11) tiene la ventaja de que ahora si está formada por una matriz hermítica y de que las funciones  $g$  son ortonormales y se pueden interpretar como amplitudes de probabilidad, más adelante veremos como este echo será fundamental para caracterizar a la función colectiva  $|\Psi\rangle$ .

Por otro lado la inversión de la matriz  $\mathcal{N}$  resultará imposible si  $\mathcal{N}$  tiene autovalores nulos ( $n_k = 0$ ). Es posible demostrar que a tales autovalores y a sus correspondientes funciones, digamos



$f^0$ , le corresponden estados MCG  $|\Psi_\sigma\rangle$  que no están determinados unívocamente. En efecto, siempre podemos añadir una función  $f^0$  y obtener el mismo estado  $|\Psi_\sigma\rangle$ .

Para encontrar una correspondencia unívoca entre los estados  $|\Psi_\sigma\rangle$  y las funciones  $f$ , debemos restringir a las funciones  $f$  a ser combinaciones lineales de las funciones  $U_k(\mathbf{q})$  con  $n_k \neq 0$ . Para cada una de estas funciones existe en el espacio de Hilbert un estado normalizado que es de la forma

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_k}} \int d\mathbf{q} U_k(\mathbf{q}) |\Psi(\mathbf{q})\rangle. \quad (7.12)$$

Estos estados son los llamados *estados naturales*.

Son estados ortogonales y sirven de base para un subespacio de Hilbert el cual encierra la dinámica de los grados de libertad colectivos.

En lugar de diagonalizar (7.11), se diagonaliza el Hamiltoniano proyectado en el espacio colectivo  $\hat{P}_C \hat{H} \hat{P}_C$ , siendo  $\hat{P}_C$  el proyector:

$$\hat{P}_C = \sum_{k, n_k \neq 0} |k\rangle \langle k| \quad (7.13)$$

Tenemos así la siguiente ecuación de autovalores

$$\sum_{k'} \langle k|H|k'\rangle g_{k'} = E g_k \quad (7.14)$$

donde

$$\langle k|H|k'\rangle = \int d\mathbf{q} d\mathbf{q}' \frac{U_k^*(\mathbf{q})}{\sqrt{n_k}} \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \frac{U_{k'}(\mathbf{q}')}{\sqrt{n_{k'}}} \quad (7.15)$$

Los autoestados correspondientes son:

$$|\Psi\rangle = \sum_{k, n_k \neq 0} g_k |k\rangle \quad (7.16)$$

Juntándola con la definición de los estados naturales (7.12) se obtiene para la función  $f$

$$f(\mathbf{q}) = \sum_{k, n_k \neq 0} \frac{g_k}{\sqrt{n_k}} U_k(\mathbf{q}) \quad (7.17)$$

Resaltemos de nuevo que esta expresión para las funciones  $f$  sólo tiene sentido si existe un número finito de autovalores con  $n_k \neq 0$ .

### 7.3 Funciones colectivas

Centremos ahora la atención en las funciones  $f(\mathbf{q})$  para comprender su significado físico. Dichas funciones se han introducido como coeficientes en la expansión del estado MCG  $|\Psi\rangle$  en términos de la base no ortogonal de estados generadores  $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$ . Sin embargo, no pueden ser interpretadas como amplitudes de probabilidad que sería lo más deseable, la razón de este comportamiento reside en lo siguiente, si realizamos el solape entre dos estados MCG tenemos

$$\langle\Psi_\sigma|\Psi_\sigma\rangle = \int d\mathbf{q}d\mathbf{q}' f_\sigma^*(\mathbf{q})f_\sigma(\mathbf{q}') \mathcal{N}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = 1. \quad (7.18)$$

La presencia de la matriz del solape en la expresión anterior hacer ver que las funciones  $f$  no pueden representar amplitudes de probabilidad.

Sin embargo si es posible definir unas nuevas funciones las cuales si poseen el significado de probabilidad. Antes de pasar a definir las veamos cual es el significado físico de las amplitudes  $f$ .

Introduzcamos para ello una nueva base, la llamada base *biortogonal* [Won70], formada por los estados  $|\bar{\Phi}(\mathbf{q})\rangle$ , estos estados se caracterizan por la propiedad

$$\langle\bar{\Phi}(\mathbf{q})|\Phi(\mathbf{q}')\rangle = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \quad (7.19)$$

En el caso en que la matriz norma tenga autovalores nulos  $n_k = 0$ , la propiedad anterior se transforma en

$$\langle\bar{\Phi}(\mathbf{q})|\Phi(\mathbf{q}')\rangle = \sum_{k, n_k \neq 0} U_k(\mathbf{q})U_k^*(\mathbf{q}') \quad (7.20)$$

Se pueden formar estados con esta propiedad expandiéndolos en la base de estados naturales

$$|\bar{\Phi}(\mathbf{q})\rangle = \sum_{k, n_k \neq 0} \frac{U_k^*(\mathbf{q})}{\sqrt{n_k}} |k\rangle \quad (7.21)$$

Por otro lado, los estados así definidos no pertenecen al espacio de Hilbert porque su norma no es necesariamente finita. La utilidad de esta construcción reside en que podemos expresar las funciones  $f$  en términos de estos estados

$$f(\mathbf{q}) = \langle\bar{\Phi}(\mathbf{q})|\Psi\rangle \quad (7.22)$$

En consecuencia  $f(\mathbf{q})$  cuantifica el solape entre el estado MCG  $|\Psi\rangle$  y el estado biortogonal  $|\bar{\Phi}(\mathbf{q})\rangle$ . En otras palabras, las funciones  $f$  representan la amplitud de probabilidad del estado biortogonal  $|\bar{\Phi}(\mathbf{q})\rangle$  en el estado MCG  $|\Psi\rangle$ . Desde este punto de vista también es claro que las funciones  $f$  no son necesariamente funciones que se comporten adecuadamente.

Volvamos ahora al problema de encontrar unas funciones que expresen amplitudes de probabilidad, dichas funciones vienen dadas como dijimos por  $\mathcal{G}$  en la ecuación de autovalores (7.11).

Sería deseable poder expresar estas funciones en términos de los estados  $U_k(\mathbf{q})$ . Para ello la relación que existe entre las  $f$  y las  $\mathcal{G}$  es  $\mathcal{G} = \mathcal{N}^{1/2} f$ , considerando ahora las expresiones (C.3) y (7.10) se llega a

$$\mathcal{G}(\mathbf{q}) = \sum_{k, n_k \neq 0} g_k U_k(\mathbf{q}) \quad (7.23)$$

El cuadrado de estas funciones expresa la probabilidad de encontrar al estado MCG ( $\mathbf{q}$ ) con un valor de la coordenada  $\mathbf{q}$ .

Para finalizar mencionemos cuales son las condiciones par que los estados  $|\Psi\rangle$  estén cercanos a los estados exactos del sistema. Esto sucede cuando el espacio colectivo contiene los autoestados del hamiltoniano, esto es lo mismo que exigir que el hamiltoniano conmute con el proyector  $\hat{P}_C$ , o que al menos esté próximo a cero.

$$[H, P_C] \cong 0 \quad (7.24)$$

Obviamente esta condición depende de la elección del conjunto de estados generadores  $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$ .

## 7.4 Valores esperados

Pasemos ahora a desarrollar la expresión para encontrar el valor esperado de un operador dado  $\hat{Q}$  en los estados MCG  $|\Psi\rangle$ , es decir,  $\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle$ .

Por definición tenemos

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle &= \int d\mathbf{q} d\mathbf{q}' f(\mathbf{q}') f(\mathbf{q}) Q_{\mathbf{q}'\mathbf{q}} \\ &= \sum_{kk'} \frac{g_{k'}}{\sqrt{n_{k'}}} \frac{g_k}{\sqrt{n_k}} \int d\mathbf{q}' d\mathbf{q} U_{k'}^*(\mathbf{q}') U_k(\mathbf{q}) Q_{\mathbf{q}'\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (7.25)$$

Donde hemos usado la identidad (7.17) y  $Q_{\mathbf{q}'\mathbf{q}}$  representan los elementos de matriz del operador  $\hat{Q}$  en la base de estados generadores

$$Q_{\mathbf{q}'\mathbf{q}} = \langle \Phi(\mathbf{q}') | \hat{Q} | \Phi(\mathbf{q}) \rangle \quad (7.26)$$

## 7.5 Resolución numérica de la ecuación de Hill-Wheeler

Pasemos ahora a discutir las diferentes posibilidades para resolver la ecuación de Hill-Wheeler (7.4). En general, en la mayoría de las aplicaciones prácticas no se cuenta con un conjunto de estados  $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$  con una variable continua. Más bien se tiene generalmente un conjunto discreto de estados. En esta situación, el método de resolución pasa por *discretizar* las integrales que aparecen en todas las expresiones anteriores.

De aquí se sigue que los solapes se convierten en matrices y la ecuación integral de Hill-Wheeler pasa a ser una ecuación matricial.

Los estados MCG pasan a ser

$$|\Psi\rangle = \sum_i f(\mathbf{q}_i) |\Phi(\mathbf{q}_i)\rangle \quad (7.27)$$

Aquí hemos admitido que la variable  $d\mathbf{q}$  se ha discretizado  $d\mathbf{q} \approx \mathbf{q}_i - \mathbf{q}_{i-1}$  y se ha incorporado a las funciones  $f(\mathbf{q})$ .

Con esta discretización pasemos ahora a formular los pasos necesarios para resolver la ecuación de Hill-Wheeler.

Comenzamos diagonalizando la matriz de solape  $\mathcal{N}$  (7.5) que ahora como hemos dicho anteriormente es una matriz

$$\mathcal{N}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} = \langle \Phi(\mathbf{q}) | \hat{H} | \Phi(\mathbf{q}') \rangle \quad (7.28)$$

A continuación obtenemos los autovalores  $n_k$  y los autovectores  $U_k(\mathbf{q})$ . En este paso debemos restringirnos a partir de ahora a trabajar con los autovalores que no sean nulos, es decir  $n_k \neq 0$  y con sus correspondientes autovectores. Además tenemos que contemplar la existencia de autovalores nulos o bien muy pequeños, los cuales han de ser desechados también. La razón principal de hacerlo es doblemente por motivos numéricos y físicos. En virtud de su valor tan pequeño es posible que no se hayan calculado con la precisión requerida y eso inducirá a que se produzcan ruidos numéricos que desvirtuen los cálculos finales. Físicamente está justificado por el hecho de que los valores pequeños en los autovalores del solape conllevan muy poca información física pues están asociados a que los estados generadores son linealmente dependientes, por otro lado estos autovectores corresponden a componentes de alto momento colectivo. Los autoestados asociados asimismo presentan un comportamiento anómalo. En consecuencia es necesario realizar una truncación en los autovalores  $n_k$ , y quedarse con aquellos que sean más grandes que una cierta tolerancia  $\epsilon$ . Obviamente la elección de la tolerancia  $\epsilon$  debe ser realizada garantizando que los resultados finales no dependan de este parámetro, es decir, que se obtenga convergencia de tanto la energía como las propias funciones de onda colectivas  $g_k$  como función de la tolerancia.

El siguiente paso consiste en formar la matriz del hamiltoniano en la base de estados naturales ecs. (7.14) y (7.15) y diagonalizarla. Esta segunda diagonalización proporciona las energías  $E$ , las

funciones colectivas  $g_k$  y los estados  $|\Psi\rangle$  en la forma (7.16). Asimismo podemos obtener las funciones  $f$  a través de (7.17), que en el caso discreto están bien definidas, pero recordemos que en el caso continuo puede no ocurrir así.

Hagamos ahora un comentario sobre el número de puntos  $\mathbf{q}_i$  que forman la base de estados generadores  $|\Phi(\mathbf{q}_i)\rangle$ . En general elegir más puntos es una buena idea para la convergencia de la energía  $E$  y para los estados MCG  $|\Phi\rangle$  (bien puede suceder que encontremos convergencia en ellos y no en las funciones  $f$ ), sin embargo pese a que intuitivamente parece razonable aumentar los puntos lo máximo posible, esto no resulta de ninguna forma práctico. La razón es la siguiente, en el momento en el que aparecen autovalores de la norma muy pequeños aumentar el número de estados  $|\Phi(\mathbf{q}_i)\rangle$  sólo hará aumentar dichos autovalores casi nulos, pues lo que se está haciendo es introducir más dependencia lineal en los estados generadores, y por tanto, no aportando información física relevante, haciendo además que el tiempo de cálculo aumente considerablemente. Todos estos aspectos los veremos analizados con cierto detalle en la parte de la tesis dedicada a las aplicaciones del MCG en granos superconductores.

Pasemos ahora a mencionar otros métodos de resolución de la ecuación de Hill-Wheller que son también usados con frecuencia en la literatura.

Existen casos especiales donde la matriz de la norma  $\mathcal{N}$  es de tal forma que es posible sin necesidad de diagonalizarla encontrar sus autovectores y sus autovalores analíticamente. Este es el caso por ejemplo cuando los elementos de la matriz de la norma dependen a través de la diferencia  $(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ , en este caso los autovectores son directamente ondas planas de la forma:

$$U_k(\mathbf{q}) \propto e^{ik\mathbf{q}} \quad (7.29)$$

y sus correspondientes autovalores son

$$n_k = \int d\mathbf{q} \mathcal{N}_{\mathbf{q},0} e^{ik\mathbf{q}}. \quad (7.30)$$

En este caso la expansión en estados naturales corresponde a una transformada de Fourier y la limitación a los autovalores más grandes de la  $\epsilon$  se traduce en una exclusión de los altos valores de  $k$ .

Esto mismo puede emplearse cuando la norma no puede ser diagonalizada analíticamente, si esta es posible aproximarla a alguna función  $\mathcal{N}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}$  que tenga la propiedad anterior.

Asimismo es común encontrar casos donde una elección del conjunto de estados generadores lleve a que la matriz de la norma pueda diagonalizarse analíticamente. La aproximación aparecerá aquí cuando la expansión en estados naturales quede truncada a un número finito de ellos.

Para finalizar con las posibles estrategias de resolución de la ecuación de Hill-Wheeler acabamos con aquellas que usan ciertas propiedades de los solapes de la norma  $\mathcal{N}$  y del Hamiltoniano  $\mathcal{H}$ . En especial existen ciertas ventajas cuando estas matrices presentan valores máximos en  $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$ .

Usando esta propiedad es posible transformar la ecuación integral de Hill-Wheeler en una ecuación diferencial de segundo orden, que es un problema mucho más manejable.

Uno de los ejemplos más importantes lo encontramos en la aproximación llamada GOA (*Gaussian Overlap Approximation*) [HW53, JS64, Kam68, Vil75] la cual se basa en aproximar la matriz de la norma por una gaussiana

$$\mathcal{N}_{q,q'} = e^{-1/2\gamma(a)s^2} \quad (7.31)$$

donde

$$a = \frac{q + q'}{2}, \quad s = (q - q') \quad (7.32)$$

representan las coordenadas del centro de masas. Para más detalles consultar [RS80] y las referencias allí dadas.

# APLICACIÓN DEL MÉTODO DE LA COORDENADA GENERADORA EN GRANOS SUPERCONDUCTORES

## 8.1 Introducción

En el capítulo anterior hemos introducido el método de la coordenada generadora (MCG) y hemos presentado su filosofía general así como la formulación necesaria para poder emplear el método.

En este capítulo exponemos una primera toma de contacto con la aplicación del MCG sobre granos superconductores. La motivación fundamental de formular y aplicar el MCG en los granos superconductores reside en plantear una teoría que conserve el número de partículas y que sea capaz de tratar la mayor cantidad de correlaciones posibles, más allá incluso de la teoría PBCS. La existencia de una solución exacta para la interacción reducida de apareamiento es un aliciente inmejorable, pues se podrá comprobar la aplicabilidad y eficiencia del MCG para estos sistemas. Así como también en modelos basados en una interacción de apareamiento generalizada que también cuentan con solución exacta, como veremos en la parte final de la tesis.

Se discutirán y valorarán asimismo las diferentes posibilidades para la elección de las coordenadas generadoras y se justificará su planteo y sus resultados en la descripción de las magnitudes físicas más importantes para la descripción de los granos superconductores.

Esto sentará las bases para la última parte de la tesis, donde desarrollaremos las aplicaciones numéricas no sólo utilizando un hamiltoniano sencillo como haremos en el próximo capítulo sino modelos más complicados con una interacción de apareamiento lo más general posible.

## 8.2 El Ansatz MCG aplicado a los granos superconductores. Aproximaciones MCGPAV y MCGVAP

Como vimos en el capítulo anterior, el ansatz MCG está dado por la expresión (7.1)

$$|\Psi_\sigma\rangle = \int d\mathbf{q} f_\sigma(\mathbf{q}) |\Phi(\mathbf{q})\rangle \quad (8.1)$$

El primer paso es establecer cual es la base formada por los estados generadores  $|\Phi(\mathbf{q})\rangle$ . En todo el trabajo desarrollado en esta tesis el conjunto de coordenadas generadoras  $\{\mathbf{q}\}$  se reduce a una sola  $\{\mathbf{q}\} \rightarrow \xi$ . Es decir trabajamos con el MCG en una dimensión.

Antes de entrar en la discusión sobre la elección de la coordenada generadora fijemos los estados  $|\Phi(\xi)\rangle$ . Las discusiones en los capítulos precedentes han servido para dejar claro que cualquier aproximación que quiera optar a una descripción satisfactoria en sistemas finitos como los granos superconductores debe estar planteada en el sistema canónico, es decir debe ser una aproximación que tenga definido el número de partículas. En consecuencia si queremos que el estado final  $|\Psi_\sigma\rangle$  tenga el número de partículas correcto la base de estados generadores debe estar también formada por autoestados del número de partículas. Es natural por tanto, elegir éstos como los de la teoría proyectada

$$|\Phi(\xi)\rangle \equiv |BCS(\xi)\rangle_N. \quad (8.2)$$

Donde ahora la dependencia en la coordenada  $\xi$  queda expresada a través de los estados  $|BCS(\xi)\rangle$ , más adelante veremos cómo construir éstos estados.

Nuestros estados MCG quedan ahora definidos como

$$|\Psi_\sigma\rangle = \int d\xi f_\sigma(\xi) |BCS(\xi)\rangle_N. \quad (8.3)$$

Veamos con más detalle la estructura del estado final MCG

$$|\Psi_\sigma\rangle = \int d\xi d\phi f_\sigma(\xi) e^{-i\phi \frac{N}{2}} \prod_k (u_k(\xi) + e^{i\phi} v_k(\xi) c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \quad (8.4)$$

Como se observa claramente la dependencia con la coordenada  $\xi$  recae en las amplitudes  $u_k(\xi), v_k(\xi)$ , que a su vez forman parte del estado proyectado  $|BCS(\xi)\rangle_N$ .

La expresión (8.4) es del todo general, y puede ser entendida más allá de la teoría presentada en el capítulo anterior. En efecto, tal y como se presenta el ansatz (8.4) los parámetros  $u_k(\xi), v_k(\xi)$  y las funciones  $f_\sigma(\xi)$  deben ser determinadas, en principio deberían obtenerse a partir del principio variacional de Ritz. Pero, esto lleva sin embargo a un sistema de ecuaciones integro-diferenciales no lineales, el cual muy complicado de resolver. Sin embargo, si pensamos que las amplitudes  $u_k(\xi), v_k(\xi)$  son conocidas entonces el problema es conocer las amplitudes  $f(\xi)$  que pueden encontrarse resolviendo la ecuación de Hill-Wheeler mediante los métodos usuales de resolución explicados en el capítulo anterior dentro del método de la coordenada generadora.

Volvamos ahora la atención a las amplitudes  $u_k(\xi), v_k(\xi)$  y expliquemos cómo determinarlas. Hemos discutido anteriormente que estos coeficientes determinan a su vez el estado  $|BCS(\xi)\rangle_N$ , como integrante de la base generadora. Debemos considerar dos casos por separado, dependiendo de las ecuaciones variacionales a resolver.

El primer procedimiento se basa en resolver las ecuaciones BCS (es decir, minimizar la energía  $\langle BCS(\xi)|H|BCS(\xi)\rangle$ ) y obtener las amplitudes  $u_k(\xi), v_k(\xi)$  (cómo generar la dependencia en la



coordenada  $\xi$  será explicado en detalle más adelante), y estas amplitudes son las que forman el estado proyectado  $|BCS(\xi)\rangle_N$  que forma parte de la base generadora, esta forma de encontrar el estado proyectado fue denominada como proyección después de la variación (PAV). La solución a la ecuación de Hill-Wheeler correspondiente será entonces denominada MCGPAV.

El segundo procedimiento consiste en determinar las amplitudes  $u_k(\xi), v_k(\xi)$  minimizando la energía  $\langle BCS|H|BCS\rangle_N$ , y resolviendo las ecuaciones varacionales de la proyección. Esta forma es la llamada variación después de la proyección (VAP). Resolviendo la ecuación de Hill-Wheeler obtenemos así el método MCGPAV.

Ambos métodos, MCGPAV y MCGVAP proporcionan una descripción del sistema dentro del sistema canónico. Obviamente el método MCGVAP proporcionará mejores resultados al tratarse del método auténticamente variacional, y el que está más cerca de resolver el problema completo que plantea el estado (8.4).

Ambos métodos han sido usados en este trabajo y comparadas con el resto de aproximaciones y con la solución exacta de Richardson.

### 8.3 Solapes de la norma y del hamiltoniano en los métodos MCGPAV y MCGVAP

Como vimos en el capítulo anterior para resolver la ecuación de Hill-Wheeler es necesario calcular anteriormente los solapes correspondientes a la norma (7.5) y al hamiltoniano (7.6). A continuación presentamos las expresiones para ambos solapes que son válidos para ambas aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

Antes que esto necesitamos introducir una definición para expresar los solapes. Se trata de una generalización de las integrales de residuo (5.10):

$$R_n^{j_1 \dots j_M}(\xi, \xi') = \frac{1}{2\pi} \int d\phi e^{-i(n_0 - n)\phi} \prod_{k \neq j_1, \dots, j_M} (u_k(\xi)u_k(\xi') + e^{i\phi}v_k(\xi)v_k(\xi')) \quad (8.5)$$

Este objeto es una extensión natural de las integrales de residuo, las cuales están contenidas en éstas cuando  $\xi = \xi'$  y juegan aquí el mismo papel que en la teoría de la proyección. Poseen propiedades semejantes a las que poseen las integrales de residuo. En el apéndice D se resumen estas propiedades y se explica la forma apropiada de calcularlas numéricamente.

Empecemos primero por el solape de la norma (7.5)

$$N_{\xi\xi'} = \langle BCS(\xi)|BCS(\xi')\rangle_N = R_0^0(\xi, \xi'), \quad (8.6)$$

y el solape del Hamiltoniano (7.6)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\xi\xi'} &= \langle BCS(\xi) | H | BCS(\xi') \rangle_N \\ &= 2 \sum_k \left( \epsilon_k - \frac{G}{2} \right) v_k(\xi) v_k(\xi') R_1^k(\xi, \xi') - G \sum_{k,l,k \neq l} u_k(\xi') v_k(\xi) u_l(\xi) v_l(\xi') R_1^{kl}(\xi, \xi'). \end{aligned} \quad (8.7)$$

Podemos ver la estrecha similitud entre estas expresiones y las correspondientes en la teoría proyectada. Así por ejemplo, el solape de la norma (8.6) es una generalización natural del solape en la teoría proyectada  $\langle BCS | BCS \rangle_N$ . Lo mismo sucede con la expresión para el solape del hamiltoniano (8.7), que es generalización de la energía proyectada (5.16). Este tipo de generalizaciones serán de mucha ayuda para encontrar valores esperados usando el MCG. Los detalles para calcular ambos solapes se dan en el apéndice D.

## 8.4 Elección de la coordenada generadora

Abordemos ahora el problema de elegir la coordenada generadora  $\xi$  para tratar las correlaciones de apareamiento en los granos superconductores y en general de la mayoría de los sistemas finitos cuyo comportamiento esté dominado fundamentalmente por la interacción de apareamiento.

Como mencionamos en el capítulo anterior sobre la teoría general de la coordenada generadora éste es un problema muy general y depende del problema físico planteado. Trataremos de dar aquí la motivación necesaria para nuestro caso.

Como hemos visto la coordenada  $\xi$  aparece a través de los estados proyectados  $BCS | BCS(\xi) \rangle_N$ , de modo que la elección de la coordenada generadora está relacionada con las diferentes posibilidades de caracterizar dichos estados. Aunque este es por su naturaleza un problema abierto, en esta tesis proponemos las que a nuestro juicio nos parecen las más relevantes.

### Primera elección: $\xi = \Delta$

Comencemos con la primera elección. Su motivación se remonta a la formulación de Anderson de la superconductividad (??), los grados de libertad colectivos asociados con las correlaciones de apareamiento son el parámetro de orden  $\Delta$  de la teoría y el ángulo de *gauge*  $\phi$ . Como sabemos, la integración sobre el ángulo  $\phi$  permite fijar el número de partículas (que es la coordenada conjugada de  $\phi$ ). Como sabemos, el parámetro  $\Delta$  no juega papel alguno en la teoría proyectada, sin embargo si es posible considerar las *fluctuaciones* en  $\Delta$ , y tenerlas así en cuenta en la teoría. La forma óptima de tratar estas fluctuaciones es utilizar este parámetro como coordenada generadora  $\xi = \Delta$  y generar estados BCS con diferentes valores de  $\Delta$ . La solución de la ecuación del *gap* autoconsistente para el modelo provee la solución  $\Delta_0$ , siendo  $\Delta_0$  el valor más probable. Se pueden generar, sin embargo, diferentes soluciones tipo  $BCS | BCS(\Delta) \rangle$  con diferentes  $\Delta$  de varias maneras. Veremos a continuación cuales son y razonaremos su grado de eficiencia.

En lugar de usar directamente el parámetro  $\Delta$  como una coordenada es más sencillo desde el punto de vista numérico generar las funciones  $| BCS(\Delta) \rangle$  indirectamente. El método más sencillo es variar  $\Delta$  directamente en las expresiones (4.13)

$$v_k^2(\Delta) = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\epsilon_k^0}{\sqrt{\epsilon_k^0 + \Delta^2}} \right) \quad u_k^2(\Delta) = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\epsilon_k^0}{\sqrt{\epsilon_k^0 + \Delta^2}} \right) \quad (8.8)$$

a la vez que se encuentra el parámetro  $\mu$  para garantizar el número de partículas en promedio correcto. Obteniéndose por tanto el conjunto de amplitudes  $u_k(\Delta)$ ,  $v_k(\Delta)$  y por tanto  $|BCS(\Delta)\rangle$ . Aunque este método es obviamente el más sencillo de implementar, no es el que mejor resultados ofrece.

Un método que sigue siendo sencillo y que como veremos en la siguiente parte de la tesis ofrece excelentes resultados es resolver las ecuaciones BCS (4.14), (4.15) para valores diferentes de la constante de interacción  $G$ . Es decir resolviendo (4.14), (4.15) para distintos valores, digamos  $G_t$ . De donde el valor del parámetro  $\Delta$  se obtendrá mediante  $\Delta = G_t \sum_k u_k v_k$ . Obviamente cuando  $G_t$  es igual a la constante del modelo  $G_t = G_{modelo}$  se obtiene la solución autoconsistente  $|BCS(\Delta_0)\rangle$ .

Hagamos algún comentario sobre el estado  $|BCS(\Delta)\rangle_N$ , según estemos en la aproximación MCGPAV o MCGVAP. Para el caso MCGPAV, las amplitudes  $u_k(\Delta)$ ,  $v_k(\Delta)$  obtenidas resolviendo las ecuaciones BCS son las que determinan el estado  $|BCS(\Delta)\rangle_N$ . Pero cuando trabajamos en la aproximación MCGVAP no parece tener sentido escribir  $|BCS(\Delta)\rangle_N$  pues en este caso siempre  $\Delta = 0$ . Lo que queremos decir al escribir tal estado en la aproximación MCGVAP es que  $\Delta$  es el valor que obtiene esta cantidad en el estado *intrínseco*, es decir usando  $\Delta = G_{trial} \sum_k u_k v_k$ , donde naturalmente no tiene por qué ser nulo.

### **Segunda elección:** $\xi = \mu$

El segundo método es el más sencillo de todos. Ahora la coordenada generadora es el potencial químico  $\mu$ . Como sabemos, en la teoría BCS éste es usado como multiplicador de Lagrange para fijar el número de partículas en promedio. En este caso usaremos el parámetro  $\mu$  libremente, sin ninguna restricción, y resolveremos las ecuaciones BCS para un valor  $\mu$  dado. El uso de diferentes valores para  $\mu$  nos permitirá generar un conjunto de estados  $|BCS(\mu)\rangle$  el cual obviamente poseen diferentes valores en promedio del número de partículas. Observemos que este hecho no tiene importancia pues finalmente proyectaremos al número de partículas requerido.

Desde el punto de vista físico, este método trata de buscar las fluctuaciones en la posición del nivel de Fermi. En el siguiente capítulo, una vez implementado esta coordenada discutiremos en detalle esta idea.

Observemos que en este caso la aproximación MCGVAP no tiene sentido realizarla por construcción (es imposible generar funciones de onda distintas usando  $\mu$  como coordenada). De modo que en ésta elección sólo podemos realizar la aproximación MCGPAV.

### **Tercera elección:** $\xi = \Delta N^2$

Este tercer método tiene por objetivo considerar las fluctuaciones alrededor de la incertidumbre en el número de partículas  $\Delta N^2 \equiv \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle$ . Para generar los estados  $|BCS(\Delta N^2)\rangle$  es necesario modificar el hamiltoniano de partida e introducir un multiplicador de Lagrange que garantice el valor requerido de  $\Delta N^2$ . El Hamiltoniano pasa a ser

$$H' = H - \mu N - \mu_2 \Delta N^2. \quad (8.9)$$

Donde el valor adecuado para  $\mu_2$  garantiza el valor deseado en la incertidumbre del número de partículas  $\Delta N^2$ .

En el caso MCGPAV las ecuaciones BCS a resolver se ven modificadas por la introducción del parámetro  $\mu_2$ , en el apéndice F se desarrollan las nuevas ecuaciones.

Para el caso MCGVAP nuevamente hemos de hacer notar que la notación  $|BCS(\Delta N^2)\rangle_N$  quiere decir que el valor de  $\Delta N^2$  se refiere a su evaluación en la función intrínseca  $\Delta N^2 = 4 \sum_k u_k^2 v_k^2$ , pues es la función proyectada obviamente  $\Delta N^2 = 0$ . En el apéndice (F) se ofrecen los detalles para estos cálculos.

---

# IV

## **CORRELACIONES DE APAREAMIENTO EN SISTEMAS FINITOS**

---



## **CORRELACIONES DE APAREAMIENTO EN GRANOS SUPERCONDUCTORES. HAMILTONIANO REDUCIDO DE APAREAMIENTO.**

### **9.1 Introducción**

Una de las primeras cuestiones que se planteó en las investigaciones sobre granos superconductores fue la que está relacionada con las propiedades superconductoras de estos sistemas. Es decir, cómo se modifican estas propiedades cuando el sistema es muy pequeño, esto es, cuando es comparable con la llamada longitud de coherencia. Anderson [And59] fue quién originalmente planteó la pregunta: ¿Qué ocurre con las correlaciones de apareamiento cuándo la muestra es muy, muy pequeña?.

Paradójicamente cuando el sistema metálico es comparable con la escala característica de la superconductividad usual, muchas de las propiedades estándar de los sistemas superconductores desaparecen. Así ocurre por ejemplo con la supercorriente, para que suceda se necesita que las dimensiones del metal sean mayores que las de la longitud de coherencia, de modo que tampoco tiene sentido hablar de resistencia nula.

Tampoco se manifiesta en estas muestras el efecto Meissner, pues la longitud de penetración necesaria para el campo magnético es más grande que las dimensiones del grano, de modo que un campo magnético externo puede penetrar por completo en el metal.

Finalmente tampoco tiene sentido hablar de pares de Cooper pues estos están caracterizados por la longitud de coherencia, la cual es mayor que el propio grano.

A partir de estas observaciones es necesario establecer qué es lo que se entiende por superconductividad en estos sistemas, y cómo caracterizarla. Para ello, es necesario recordar cual es la idea esencial que reside en la teoría de la superconductividad. Esta no es otra que la noción de *correlaciones de apareamiento*.

La idea de correlaciones de apareamiento fue introducida por Bardeen, Cooper y Schrieffer cuando en su trabajo [BCS57] demostraron que en el estado fundamental de un superconductor existen correlaciones entre los electrones que no están presentes en el estado normal conductor. A

temperaturas cercanas al cero absoluto estas correlaciones de apareamiento forman pares de electrones, los cuales tienen una probabilidad no nula de encontrarse con una energía por encima de la energía de Fermi, en un rango tal que viene definido por el *gap* superconductor  $\tilde{\Delta}$ . Estas correlaciones explican todas las propiedades familiares de la superconductividad mencionadas más arriba.

En consecuencia, la cuestión principal que debe plantearse sobre los granos superconductores es la que postuló Anderson: ¿Qué le ocurre a las correlaciones de apareamiento cuándo el metal es muy pequeño?

Anderson formuló esta cuestión hacia 1959, y su respuesta indicó que si la muestra es tan pequeña que el espectro de niveles electrónicos es discreto (con espaciado  $d$ ) entonces los fenómenos asociados con la superconductividad no serían posibles si la distancia  $d$  entre los niveles fuera  $d > \tilde{\Delta}$ . Esta respuesta puede justificarse mediante el siguiente argumento:  $\tilde{\Delta}/d$  es el número de electrones libres que pueden correlacionarse por parejas, pues son los que tienen energías dentro del rango  $\tilde{\Delta}$  centrado en  $\epsilon_F$ , en consecuencia cuando este cociente es menor que uno no tiene sentido llamar al sistema superconductor.

Desde el punto de vista experimental Giaver y Zeller [GZ68] fueron los primeros en probar la hipótesis de Anderson. Estudiaron la corriente túnel a través de películas de Aluminio las cuales contenían granos de estaño. Demostraron la existencia de un *gap* de energía para los granos con un tamaño similar al establecido por Anderson (aproximadamente  $25\text{\AA}$  en este caso). Sin embargo no pudieron demostrar nada para partículas más pequeñas: *"No se puede dudar, sin embargo, que en esta región la teoría de la superconductividad usual pierde su sentido. De hecho, quizás no deberíamos llamar a tales partículas metálicas porque el espaciado de los niveles es grande comparado con  $kT$  y porque hay muy pocos electrones en la superficie de Fermi. La cuestión sobre el límite inferior para la superconductividad está fuertemente relacionado con la definición de superconductividad en sí misma"*.<sup>1</sup>

Estas palabras indican sucintamente por qué el estudio de la superconductividad en el límite inferior es de fundamental interés, la teoría convencional BCS es inaplicable, y los elementos básicos de la teoría necesitan ser reconsiderados, en especial la discretitud de los niveles debe tener especial atención.

Los primeros pasos en esta dirección fueron los cálculos de propiedades termodinámicas de pequeños granos superconductores por Strongin [STKC70b] *et al.* y Muhlschlegel *et al.* [MSD72]. Sin embargo, aquellos experimentos eran realizados con grupos de granos pequeños (películas granulares), no había incentivo desde el punto de vista experimental para desarrollar una teoría más elaborada sobre los granos metálicos individuales, cuyo espectro individual, por ejemplo, sería de esperar que revelara la relación entre la discretitud de los niveles y las correlaciones de apareamiento.

Pero la situación experimental cambió dramáticamente en 1995 cuando un grupo liderado por

---

<sup>1</sup>*There can be no doubt, however, that in this size region the bulk theory of superconductivity loses its meaning. As a matter of fact, perhaps we should not even regard the particles as metallic because the energy-level spacing is large compared to  $kT$  and because there are very few electrons at the Fermi surface. The question of the lower size limit for superconductivity is, therefore, strongly correlated with the definition of superconductivity itself.*



M. Tinkham y formado por D. C. Ralph y C. T. Black tuvieron éxito al lograr usar por vez primera un transistor de electrón individual (*single electron transistor*, SET) en cuyo centro se situaba un grano metálico con un diámetro aproximado de 10 nm (para más detalles ver la parte II de esta tesis). Estudiando la corriente túnel a través del dispositivo, lograron las primeras medidas con éxito del espectro electrónico de un grano individual.

Esta técnica nueva permite probar también efectos ligados al acoplo espín-órbita [BRT96, RBT96], excitaciones fuera del equilibrio u otros fenómenos superconductores [BRT96, RBT97]. Estos fenómenos se manifiestan a través de la aparición (ausencia) de un *gap* espectroscópico en los granos con un número par (impar) de electrones.

En la presente parte de la tesis desarrollaremos varias aproximaciones teóricas conocidas y propondremos una nueva aproximación para estudiar granos superconductores con dos objetivos fundamentales en mente:

1. Estudiar las correlaciones de apareamiento en los granos superconductores, y cómo cambia su naturaleza desde el límite BCS hasta el momento en el que sólo interactúan unos pocos electrones.
2. Extender nuestra aproximación a modelos teóricos más complicados para poder describir más fenómenos ligados a las fuertes correlaciones en sistemas finitos.

De esta forma en esta parte de la tesis introduciremos el hamiltoniano de apareamiento reducido BCS (4.1) para describir las correlaciones de apareamiento en el grano superconductor, para estudiar sus propiedades cualitativamente se introduce un Ansatz BCS gran canónico. Se estudiarán las energías de condensación (ver más adelante) para sistemas pares e impares prestando especial atención a la región de transición entre el límite termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ) y el dominado por pocos electrones, así como las manifestaciones y los efectos de paridad. Como el Ansatz BCS no es suficiente para estudiar el sistema es necesario acudir a un Ansatz canónico que conserve el número de partículas, desde el punto de vista experimental es del todo necesario acudir al sistema canónico pues en los experimentos el número de electrones no sufre fluctuaciones (ver el capítulo 2).

De esta forma se estudiarán las propiedades mediante el método proyectado PBCS, comparándolo con los resultados obtenidos usando el Ansatz gran canónico BCS se analizarán las ventajas y defectos del método proyectado. Como el método PBCS no captura la esencia de las correlaciones electrónicas es necesario compararlo con la solución exacta de Richardson (capítulo 6). Ambos métodos canónicos, PBCS y la solución exacta permiten la completa descripción entre el límite termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ) y el régimen dominado por pocos electrones, incluiremos asimismo un cuidadoso análisis de la estructura de las funciones de onda para aclarar la naturaleza de las correlaciones de apareamiento.

Finalmente compararemos todo lo anterior con el método propuesto en esta tesis, un Ansatz canónico basado en el método de la coordenada generadora MCG el cual tendrá en cuenta las correlaciones que no están incluidas en el resto de aproximaciones, demostraremos que es capaz de reproducir los resultados exactos de la solución de Richardson. Resultados que ofrecen muy buenas perspectivas de cara a usar modelos más complicados que no puedan resolverse exactamente.

## 9.2 El modelo

En toda esta parte de la tesis usaremos en todos los cálculos el modelo que explicamos cuando discutimos la aproximación BCS. Citaremos aquí a modo de resumen las propiedades más importantes.

El hamiltoniano del modelo es el llamado hamiltoniano BCS reducido, que tiene por expresión:

$$H = \sum_{k,\sigma=\pm} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - G \sum_{k,k'} c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+}. \quad (9.1)$$

Notemos que aquí no aparece el potencial químico  $\mu$ . Este es sólo necesario en el contexto gran canónico, así que sólo haremos uso de él en los cálculos dentro de la teoría BCS. En la teoría proyectada su uso no es realmente necesario, en realidad sólo fija el número de partículas en promedio del estado intrínseco y no afecta a los cálculos, así que puede ponerse idénticamente nulo  $\mu = 0$ . Esto es lo que usaremos en los cálculos PBCS a menos que se indique lo contrario.

El hamiltoniano (9.1) actúa sobre una base de estados etiquetados por  $|k\pm\rangle$ , los cuales pueden acomodar dos estados de partícula degenerados (inverso temporales uno de otro) en cada nivel  $k$  distinguiéndose entre ellos por el signo  $\pm$ . Las energías de los niveles  $k$  poseen energías  $\epsilon_k$ , las cuales se eligen de la forma  $\epsilon_k = kd$ , es decir, equiespaciadas con espaciado  $d$ . Si  $N$  es el número total de electrones y  $n_0$  es el número de pares, entonces  $N = 2n_0 + p$ , siendo  $p = 0(p = 1)$  para el sistema par (impar). Usamos el valor  $k = 0$  para aquel nivel cuya ocupación en el estado fundamental sea  $p$ . Se escoge el número de niveles igual al de partículas  $N$ .

La constante de interacción  $G$  la elegimos como  $G = \lambda d$ , donde  $\lambda$  es un parámetro sin dimensiones que define al metal. Esta constante está relacionada con otros parámetros que definen al sistema como el parámetro de orden para el sistema infinito  $\tilde{\Delta}$  y la frecuencia de Debye ( $\omega_D$ ). La ligadura entre ellas está expresada a partir de la ecuación del *gap* en el límite termodinámico  $\sinh(1/\lambda) = \omega_D/\tilde{\Delta}$ . El valor numérico de  $\lambda$  poco importa si las cantidades calculadas están expresadas en unidades de  $\tilde{\Delta}$ , la cual absorbe toda la dependencia en  $\lambda$ . Aún así citaremos aquí los valores usados en esta parte del trabajo. Para el aluminio los valores aproximados son  $\tilde{\Delta} = 0.38\text{meV}$  y  $\lambda = 0.224$ .

## 9.3 Resultados preliminares: elección $\xi = \Delta$

En esta parte estudiaremos como a modo de resultados preliminar los cálculos realizados para varias magnitudes predichos por las distintas aproximaciones desarrolladas en la parte III de esta tesis.

Para los cálculos con el MCG nos centraremos por el momento con la elección de la coordenada generadora  $\xi = \Delta$ . Posteriormente extenderemos estos cálculos para el resto de las elecciones.

### 9.3.1. Energías de condensación

Existe una extensa literatura tanto en materia condensada como en física nuclear sobre las aplicaciones de la teoría BCS, tanto en su forma original como ampliaciones y variaciones. Pese a que la aplicación de la teoría BCS en sistemas finitos es básicamente por definición inaceptable, en virtud de que estos sistemas exigen una descripción canónica, es cierto que una descripción razonable de un sistema finito mediante la teoría BCS sea factible. Aunque generalmente a partir de tal descripción sólo pueden obtenerse conclusiones cualitativas, debido al gran error cometido por la aproximación BCS.

A pesar de esto la formulación BCS es tan sencilla y permite obtener resultados tan rápidamente que es un buen punto de partida para obtener conclusiones previas y posteriormente confrontarla con aproximaciones más elaboradas.

El gran éxito de la formulación de la teoría BCS, a pesar de su sencillez, reside fundamentalmente es que debido a que su *Ansatz* (4.2) da lugar al fenómeno de la ruptura espontánea de simetría y la consiguiente aparición del parámetro de orden  $\tilde{\Delta}$  de la teoría. Las fluctuaciones del número de partículas son del orden de  $1/\sqrt{N}$  (y de aquí el grado de error cometido), siendo  $N$  el número de partículas del sistema.

Obviamente para sistemas grandes esta cantidad es despreciable. Del mismo modo sucede con las fluctuaciones del parámetro de orden  $\tilde{\Delta}$ . En nuestro caso, para sistemas finitos donde el número de partículas se considera pequeño, como el caso de los granos superconductores, no pueden despreciarse tales fluctuaciones. En realidad son estas fluctuaciones las que dominan las propiedades macroscópicas en estos sistemas, de modo que forzosamente es necesario incluir más correlaciones en los estados para obtener resultados razonables.

Pasemos ahora a la definición de una cantidad que caracteriza la presencia de correlaciones de apareamiento, y que además permita describir la transición desde el régimen de muchas partículas o límite termodinámico ( $N \rightarrow \infty$ ) hasta el de pocas partículas y dominado por fluctuaciones. Esta cantidad es la *energía de condensación*  $E_{con}$ . Se define como la diferencia entre la energía total del estado fundamental y la energía del estado de Fermi no correlacionado.

$$E_{con} = \langle H \rangle - E_F \quad (9.2)$$

donde:

$$E_F = \langle 0|H|0 \rangle_0 \quad \text{siendo} \quad |0 \rangle_0 = \prod_{k < N/2} c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger |-\rangle. \quad (9.3)$$

En el caso que nos ocupa el Hamiltoniano reducido BCS (4.1) y para el sistema con número par de electrones la energía del mar de Fermi descorrelacionado es:

$$\langle 0|H|0 \rangle_0 = 2 \sum_{k=1}^{N/2} \epsilon_k - G \frac{N}{2}. \quad (9.4)$$

Para el caso en el que el sistema tenga un número impar de partículas y en el estado fundamental la expresión anterior (9.4) queda sustituida por la siguiente (asumiendo que el nivel ocupado por el electrón desapareado sea  $l$ ):

$$\langle 0|H|0\rangle_0 = 2 \sum_{k=1}^{(N-1)/2} \epsilon_k - G \frac{N-1}{2} + \epsilon_l \quad (9.5)$$

Pasamos a analizar esta cantidad en función del tamaño del sistema (número de partículas). Para hacerlo es conveniente usar la cantidad  $d/\tilde{\Delta} = 2 \sinh(1/\lambda)/N$  que describe perfectamente los distintos regímenes, el de pocas partículas  $d/\tilde{\Delta} \gg 1$ , muchas partículas (*bulk*)  $d/\tilde{\Delta} \ll 1$  y la transición entre ambos  $d/\tilde{\Delta} \approx 1$ .

Hemos calculado esta cantidad para el estado fundamental en las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV, MCGVAP y exacta. Hemos realizado los cálculos desde un sistema con 20 electrones hasta un tamaño con 600 electrones.

Los resultados correspondientes a las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP se han realizado usando el parámetro  $\Delta$  como coordenada generadora  $\xi = \Delta$ , la comparación con las demás elecciones la realizaremos más adelante. En la fig. 9.1 se representa la energía de condensación en unidades de  $\tilde{\Delta}$  como función del espaciado  $d/\tilde{\Delta}$  para las aproximaciones indicadas.

La teoría BCS predice bien como era de esperar el comportamiento en el límite de muchas partículas ( $d/\tilde{\Delta} \ll 1$ ) pero no el caso de pocas pues sugiere la desaparición de las correlaciones de apareamiento para unos espaciados dados por  $d/\tilde{\Delta} \approx 2.25 (\approx 0.75)$  para el sistema par (impar), sucediendo por tanto para un número de partículas menor en el caso par que el impar, debido a la presencia del par electrónico desapareado en el sistema impar.

No sucede así en el resto de aproximaciones, la energía de condensación es siempre negativa demostrando de esta forma que el sistema ya sea par o impar puede ganar energía a expensas de la correlación entre pares, independientemente del tamaño del sistema. Por otro lado estas energías son siempre menores que en la predicción BCS para cualquier espaciado, verificándose así que la teoría BCS es irrealista y queda lejos de ser aplicable en tales sistemas.

Centrémonos ahora en las predicciones de la teoría proyectada PBCS. De nuevo, el método PBCS es capaz de recuperar el límite de muchas partículas ( $d/\tilde{\Delta} \ll 1$ ). En la región de pocas partículas el comportamiento es bueno, en el caso impar incluso reproduce la solución exacta. Antes estos resultados sería de esperar que la transición entre ambos regímenes que es la zona importante estuviera en acuerdo con la solución exacta. Sin embargo la curva PBCS predice una transición abrupta, es decir no del todo suave, que es mucho más acusada en el caso impar. Esto se desprende de las curvas al observar como pasa en ambos casos de ser extensiva ( $\sim d$ ) en la región ( $d/\tilde{\Delta} \ll 1$ ) a prácticamente intensiva (independiente del espaciado  $d$ ) para ( $d/\tilde{\Delta} \gg 1$ ).

Esto indica que por parte de la aproximación PBCS aún queda un remanente gran canónico y se muestra incapaz de capturar la esencia de la transición entre ambas regiones. Esta predicción abrupta resulta por tanto artificiosa y contraria a la solución exacta, haciendo entender que la teoría

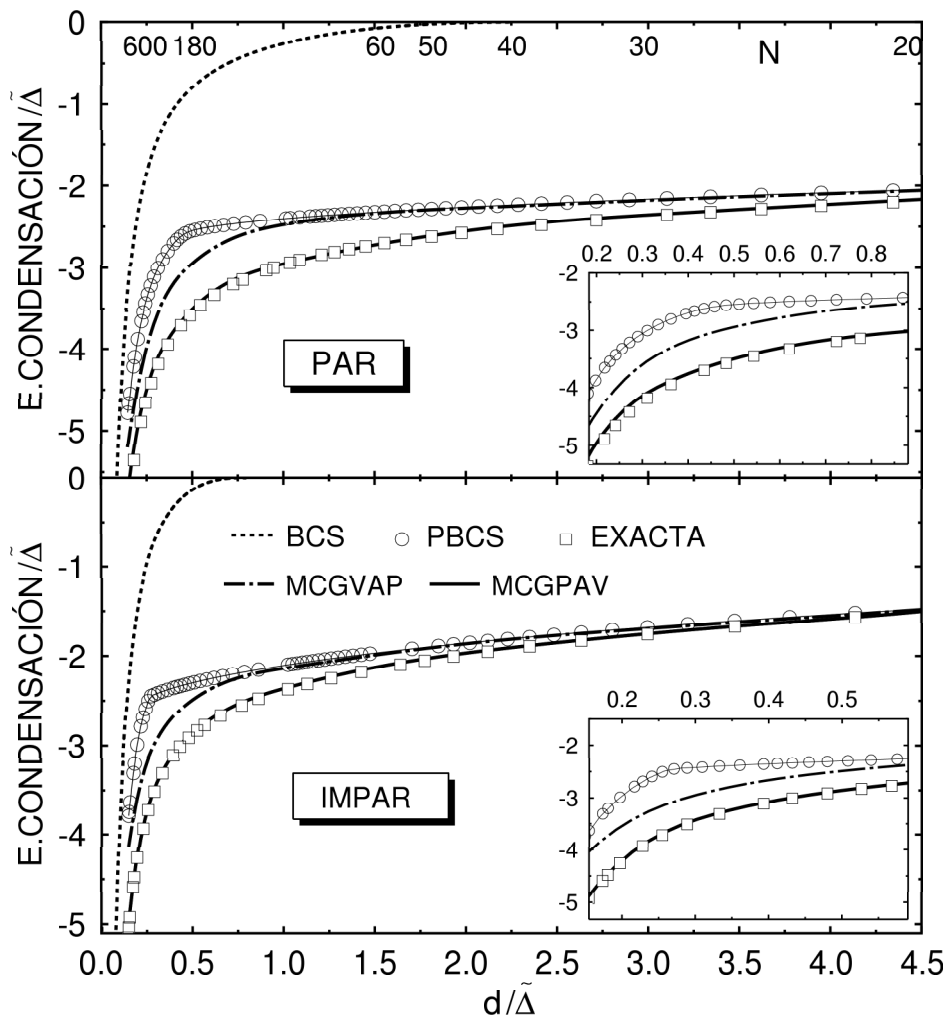


Figura 9.1: Energías de condensación del estado fundamental en unidades de  $\tilde{\Delta}$ . Los insets muestran detalles de la transición entre el régimen de transición. La escala en la parte de arriba de la gráfica superior indica el número de partículas correspondientes a los espaciados de la escala inferior.

proyectada resulta insuficiente para el tratamiento de las correlaciones de apareamiento en sistemas finitos.

J. Dukelsky y G. Sierra [DS99, DS00] usaron el método de la matriz densidad en el grupo de renormalización (*Density matrix renormalization group*) DMRG para mejorar los resultados de la teoría proyectada y encontraron que predecía con exactitud la solución exacta (allí los cálculos fueron realizados hasta 400 electrones). Confirmando así que la aproximación DMRG era excelente para tratar las correlaciones de apareamiento con el Hamiltoniano reducido BCS.

También recientemente se ha usado la aproximación aleatoria de la fase autoconsistente (*Self-consistent Random Phase Approximation*) SCRPA [HMDS02] para tratar el modelo y comprobaron que la predicción SCRPA estaba en buen acuerdo con los resultados exactos de Richardson.

Pasemos a la discusión de los resultados ofrecidos por el MCG. En primer lugar, vemos que am-

bas aproximaciones mejoran los resultados de la proyección. Concentrémonos en la curva MCGPAV. En ambos límites ( $d/\tilde{\Delta} \ll 1$ ) y ( $d/\tilde{\Delta} \gg 1$ ) coincide con la teoría proyectada PBCS. En la región de transición entre ambas, no se encuentra aquí sin embargo una transición abrupta como sucede con la proyección. La transición es suave para todos los espaciados pero está lejos de la solución exacta. No sucede lo mismo con la aproximación MCGVAP que es capaz de reproducir la solución exacta con una precisión de  $10^{-3} - 10^{-4}$ .

Desde este punto de vista, la aproximación MCGPAV ofrece una descripción virtualmente exacta para las energías de condensación, y como método aproximado puede compararse con los resultados proporcionados por el DMRG [DS99].

Para analizar con más detalle la calidad de la aproximación MCGPAV es necesario analizar la estructura de estos estados, es decir, entender físicamente el comportamiento de las funciones de onda determinadas por dichos estados.

### 9.3.2. Estructura de las funciones de onda: correladores

Pasemos ahora al estudio de la estructura de las funciones de onda con el objetivo de cuantificar la calidad de las aproximaciones usadas, fundamentalmente las que proporcionan las del método MCG, y así como el comportamiento en detalle entre los regímenes de muchas y pocas partículas y en el régimen de transición.

Para ello es necesario definir alguna cantidad que sea sensible al cambio de las funciones de onda. Esta cantidad es la llamada correladores, que se definen de la forma siguiente:

$$C_k^2 = \langle c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k-} c_{k+} \rangle \langle c_{k-} c_{k+} c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger \rangle \quad (9.6)$$

o de forma análoga:

$$C_k^2 = \langle c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle - \langle c_{k+}^\dagger c_{k+} \rangle \langle c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle. \quad (9.7)$$

Los valores esperados deben ser calculados usando los estados de cada una de las aproximaciones. Estas cantidades cuantifican la probabilidad de que un cierto nivel  $k$  esté ocupado y vacío al mismo tiempo. De la misma forma se puede decir que cuantifican las fluctuaciones en los números de ocupación. De su definición se desprende que estos correladores son nulos en ausencia de correlaciones de apareamiento.

Demos las expresiones correspondientes para estos correladores en las distintas aproximaciones, para el cálculo explícito de estas cantidades consultar el apéndice G.

Para la teoría BCS encontramos

$$(C_k^2)_{BCS} = v_k^2 - v_k^4. \quad (9.8)$$

En la teoría proyectada se tiene

$$(C_k^2)_{PBCS} = \frac{R_1^k}{R_0^0} v_k^2 - \left( \frac{R_1^k}{R_0^0} \right)^2 v_k^4. \quad (9.9)$$

Para la solución de Richardson

$$(C_k^2)_{EXACTA} = n_k - n_k^2 \quad (9.10)$$

Donde las cantidades  $n_k$  están dadas por  $n_k = \langle \Phi | c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k+} c_{k-} | \Phi \rangle$ . De nuevo en el apéndice G se muestra como calcular estas cantidades.

Para el caso del MCG tenemos

$$C_k^2 = \sum_k \sum_{k'} \frac{g_{k'}}{\sqrt{n_{k'}}} \frac{g_k}{\sqrt{n_k}} \int d\xi' d\xi U_{k'}^*(\xi') U_k(\xi) \left( v_k(\xi') v_k(\xi) \frac{R_1^k(\xi', \xi)}{R_0^0(\xi', \xi)} \right) - \left( \sum_k \sum_{k'} \frac{g_{k'}}{\sqrt{n_{k'}}} \frac{g_k}{\sqrt{n_k}} \int d\xi' d\xi U_{k'}^*(\xi') U_k(\xi) \left( v_k(\xi') v_k(\xi) \frac{R_1^k(\xi', \xi)}{R_0^0(\xi', \xi)} \right) \right)^2. \quad (9.11)$$

Los correladores se muestran en la fig. 9.2 para las distintas aproximaciones como función de las energías de monopartícula  $\epsilon_k$  medidas respecto del nivel de Fermi  $\epsilon_F$  y en unidades de  $\tilde{\Delta}$ . Se han considerado tres espaciados  $d/\tilde{\Delta}$  que corresponden a tres situaciones distintas, todas ellas para el caso de un número par de electrones. Para pocas partículas ( $d/\tilde{\Delta} = 0.5$ ) (región de apareamiento muy débil), región intermedia ( $d/\tilde{\Delta} = 2.17$ ) (apareamiento débil) y para la región de transición ( $d/\tilde{\Delta} = 4.34$ ). Como referencia en todas ellas se ha añadido la curva correspondiente al caso BCS en el límite ( $d \rightarrow 0$ ).

Analicemos las tres situaciones. La curva BCS muestra un pico característico de anchura  $\approx \tilde{\Delta}$  concentrada alrededor de la energía de Fermi. Esto corresponde a la usual descripción BCS de las correlaciones de apareamiento implicando que las correlaciones de apareamiento están localizadas en el espacio de energías alrededor de la energía de Fermi.

Concentrémonos en el panel a). Esta situación corresponde a al régimen de muy pocas partículas, es decir a la situación de interacción muy débil, donde más fuertes son las fluctuaciones de apareamiento. Como vemos aquí, la naturaleza de las correladores de apareamiento es tal que están deslocalizadas en energía, esto se desprende al observar que los estados en energía lejos de  $\epsilon_F$  tengan mucha contribución a los  $C_k$ . Esto contribuye a que sean importantes las correlaciones de apareamiento. La aproximación MCGVAP es a los efectos prácticos indistinguible de la solución exacta, mientras que la proyección BCS y MCGPAV son incapaces de proporcionar la suficientes correlación en la región central. A pesar de esto la diferencia no es grande y demuestra que en las energías de condensación el acuerdo con la solución exacta sea bueno.

En la región de apareamiento débil correspondiente al panel b), las correlaciones se incrementan alrededor del nivel de Fermi, pero de nuevo la aproximación PBCS y MCGPAV no son capaces

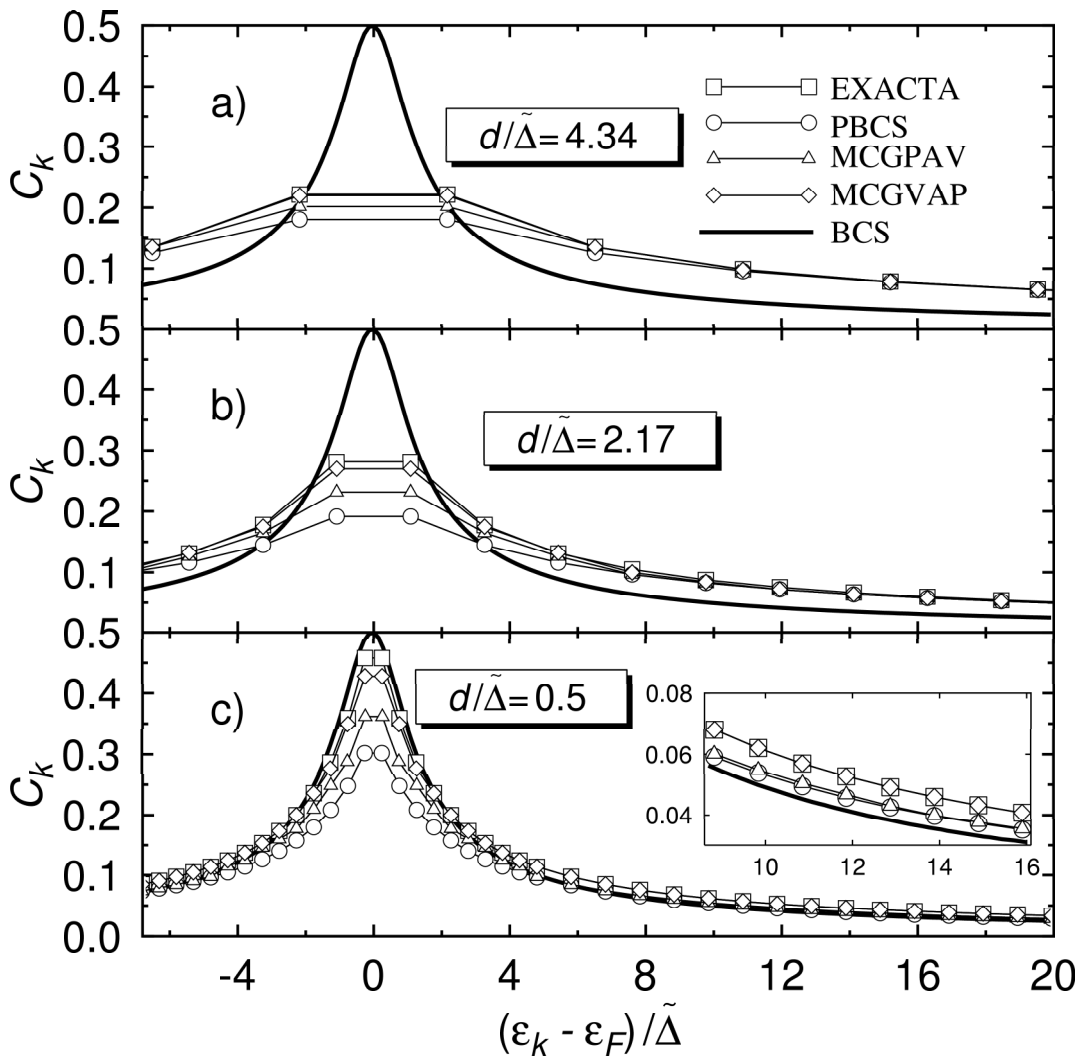


Figura 9.2: El conjunto de correladores  $C_k$  para tres espaciados diferentes  $d/\tilde{\Delta} = 4.34$ ,  $d/\tilde{\Delta} = 2.17$  y  $d/\tilde{\Delta} = 0.5$  como función de las energías de los niveles electrónicos  $\epsilon_k$  centrados en  $\epsilon_F$  en unidades de  $\tilde{\Delta}$ . Para facilitar la comparación se representa también la curva para  $d = 0$  según la teoría BCS. El inset de la figura (c) muestra los detalles lejos de la energía de Fermi  $\epsilon_F$

de compararse a la solución exacta y a MCGVAP que de nuevo coinciden con excelente acuerdo. Es notable el hecho del comportamiento de la solución PBCS, estando tan alejado de la solución exacta.

La región de transición se muestra en el panel c). La solución exacta y MCGPAV están muy cerca de la solución BCS ( $d \rightarrow 0$ ). Y, una vez más, las aproximaciones MCGPAV y PBCS, en especial esta última quedan demasiado lejos de la exacta. Como vemos, el abrupto comportamiento de la aproximación PBCS en la región de transición correspondientes a la energía de condensación tiene explicación bajo el punto de vista de los correladores: la escasa contribución en la región alrededor de la energía de Fermi no permite capturar la naturaleza de las correlaciones. Asimismo para la aproximación MCGVAP podemos deducir que la mejora en los correladores induce a que en la zona de transición no sea abrupta como en el caso PBCS y trate mejor las correlaciones de



apareamiento.

### 9.3.3. La dependencia en la paridad de número: el parámetro de Mateev-Larkin

Estudiemos la dependencia con la paridad de número, es decir, con respecto a sí el sistema posee un número par de partículas o impar. Mateev y Larkin (ML) [ML97] introdujeron un parámetro  $\Delta_{ML}$  para analizar esta dependencia. Este parámetro se define como la diferencia de energía entre el estado fundamental del sistema impar y la energía media de los dos sistemas pares vecinos:

$$\Delta_{ML} = E_{N+1} - \frac{1}{2}(E_N + E_{N+2}) \quad N \text{ es par.} \quad (9.12)$$

La definición de este parámetro se inspira en el hecho de que para el límite termodinámico ( $d \rightarrow 0$ ) el parámetro  $\Delta_{ML}$  se reduce al parámetro de orden  $\tilde{\Delta}$ . Esto es así pues en ese límite el sistema impar está en un estado que posee una diferencia de energía  $\tilde{\Delta}$  con respecto al condensado par. En el régimen opuesto  $d \gg \tilde{\Delta}$ , ML calcularon  $\Delta_{ML}$  perturbativamente derivando una constante de acoplo renormalizada para la cual encontraron

$$\Delta_{ML} = d / (2 \log(ad/\tilde{\Delta})). \quad (9.13)$$

Donde la constante  $a$  es usada como parámetro de ajuste.

En la figura fig. 9.3 se muestra el cálculo de  $\Delta_{ML}$  para las diferentes aproximaciones y el cálculo exacto. En una primera inspección observamos que las diferentes aproximaciones no difieren cualitativamente pero si existen diferencias cuantitativas muy apreciables.

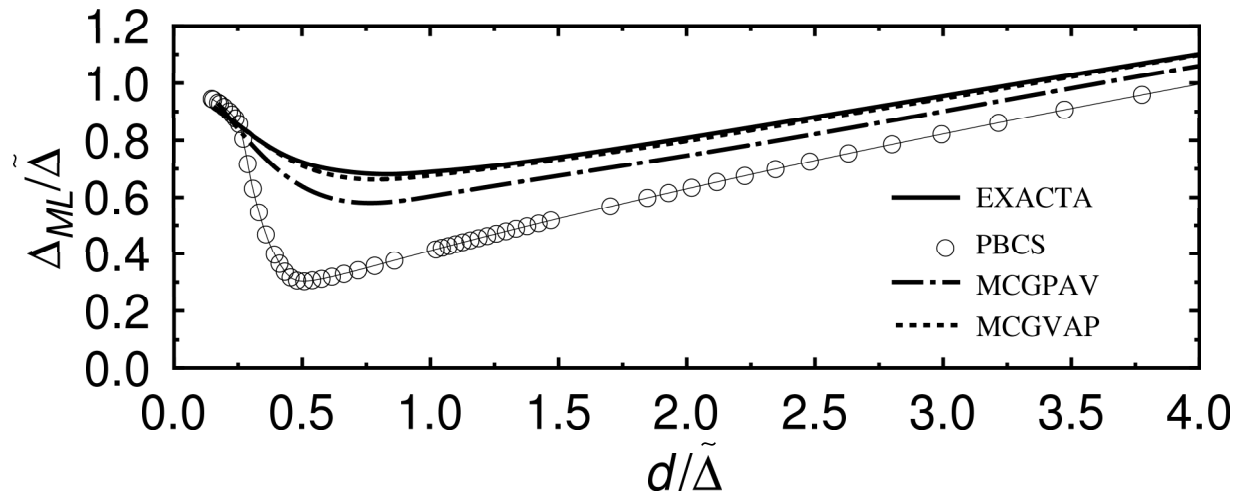


Figura 9.3: El parámetro de Mateev-Larkin como función del espaciado  $d$  en unidades de  $\tilde{\Delta}$ .

El comportamiento general es similar: en el límite de muchas partículas ( $d/\tilde{\Delta} \ll 1$ ) el parámetro  $\Delta_{ML}$  tiende a  $d\tilde{\Delta}$ , siendo esta por tanto la energía necesaria que cuesta mantener un electrón en el sistema impar. Conforme aumenta ( $d/\tilde{\Delta}$ ) y disminuye el número de partículas y las energías de

apareamiento, el coste de energía por mantener el electrón de más también disminuye. En el caso opuesto de pocas partículas y dominado por fluctuaciones de apareamiento ( $d/\tilde{\Delta} \gg 1$ ) el parámetro  $\tilde{\Delta}_{ML}$  posee el comportamiento dictado por (9.13).

El método proyectado PBCS reproduce el resultado exacto en la región de muchas partículas ( $d/\tilde{\Delta} \ll 1$ ) y al menos de forma asintótica en el régimen de pocas partículas. Pero, una vez más, subestima las correlaciones en la región de transición prediciendo valores más pequeños y un mínimo más abrupto que la solución exacta, la cual vuelve a indicar una transición entre ambos regímenes completamente suave. Por otro lado, las aproximaciones basadas en el MCG predicen un comportamiento también suave en la transición. La aproximación MCGPAV es cercana a la solución exacta y la MCGVAP coincide con ella.

### 9.3.4. Funciones de onda colectivas

Ahora es el momento de analizar más en detalle la estructura de las funciones de onda correspondientes a los estados del MCG. Analizando su comportamiento en el espacio colectivo generado por  $\Delta$  podemos conocer cómo el método de la coordenada generadora trata las correlaciones de apareamiento.

La cantidad que representa las amplitudes de probabilidad en las funciones colectivas del MCG  $|\Psi\rangle$  fue discutida en el capítulo 7. Allí obtuvimos la expresión (7.23) para dichas funciones. Ahora en nuestro caso, la coordenada generadora es el parámetro  $\Delta$ , de modo que tenemos:

$$\mathcal{G}(\Delta) = \sum_{k, n_k \neq 0} g_k U_k(\Delta). \quad (9.14)$$

Las probabilidades  $|\mathcal{G}(\Delta)|^2$  expresan por tanto cuales son las componentes de los estados MCG  $|\Psi\rangle$  más probables en términos del parámetro  $\Delta$ .

En la fig. 9.4 mostramos las funciones (9.14) y para facilitar su interpretación también se muestran las energías  $E(\Delta) = \mathcal{H}_{\Delta\Delta}/\mathcal{N}_{\Delta\Delta}$  como función de  $\Delta$  para diferentes espaciados  $d/\tilde{\Delta}$  correspondientes a diferentes regímenes de apareamiento. La superficie de energía descrita por  $E(\Delta)$  representa la *rigidez* del sistema respecto a los cambios en el parámetro  $\Delta$ .

En general obtenemos curvas parabólicas abiertas en el régimen de acoplamiento débil (pocas partículas) y extraordinariamente cerradas en el régimen de acoplamiento fuerte (muchas partículas). El comportamiento de ambas aproximaciones MCGPAV y MCGVAP es cualitativamente similar. Observemos que los mínimos de las parábolas correspondientes a la aproximación MCGVAP corresponde a los valores de la solución obtenida con el método proyectado PBCS.

Comencemos analizando la región con interacción muy débil  $d/\tilde{\Delta} = 4.34$ . Para esta región el valor más probable para  $\Delta$  es cero, y componentes con un valor de  $\Delta$  de hasta  $\Delta = 20\tilde{\Delta}$  se espera que contribuyan a  $|\Psi\rangle$ . Este resultado muestra claramente como las correlaciones en este régimen están dominadas por fluctuaciones en el parámetro  $\Delta$ . Esta conclusión esta además en acuerdo con el panel a) de la figura fig. 9.2 donde la distribución de los correladores esta aplanada. Para el caso  $d/\tilde{\Delta} = 2.17$ , la curva de energía es aún ancha, aunque menor que para  $d/\tilde{\Delta} = 4.34$ . La distribución tiene un ligero pico en  $\Delta = 0.32\tilde{\Delta}$  y se extiende hasta  $10\tilde{\Delta}$ . La energía y la función de onda

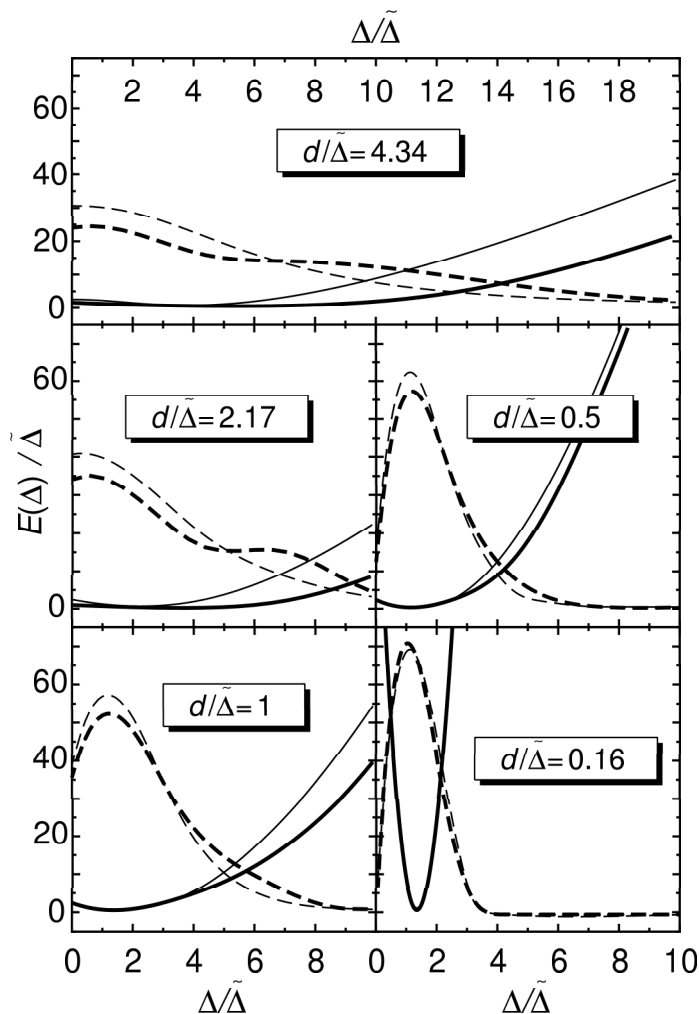


Figura 9.4: Las energías proyectadas  $E(\Delta)$  = respecto de  $\Delta$  en las aproximaciones MCGPAV (línea continua fina) y MCGVAP (línea continua gruesa). Las funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(\Delta)|^2$  para las aproximaciones MCGPAV (línea fina discontinua) y MCGVAP (línea discontinua gruesa). La escala aplica para las energías  $E(\Delta)$  cuyo mínimo ha sido situado en cero.

para  $d/\tilde{\Delta} = 1$  y para  $d/\tilde{\Delta} = 0.5$  corresponde claramente a una región de transición, las curvas de energía no son suaves pero tampoco son muy rígidas, y las funciones de onda presentan un pico relativamente claro para un determinado valor de  $\Delta$ . El límite de fuerte acoplamiento se alcanza para  $d/\tilde{\Delta} = 0.16$  donde la probabilidad se encuentra fuertemente concentrada en el valor  $\tilde{\Delta}$  y la curva de energía es muy rígida contra los cambios en el parámetro  $\Delta$ .

La fig. 9.5 además nos ayuda a entender la física de las otras aproximaciones.

Por ejemplo, si miramos por los valores más probables del parámetro  $\Delta$  predichos por MCGVAP, es decir, el valor  $\Delta$  donde la función colectiva presenta un valor pronunciado en los distintos regímenes. Esta cantidad está representado en la fig. 9.5. Junto con ellos está la predicción para dicho parámetro de teoría BCS. Como se aprecia encontramos un excelente acuerdo entre ambas en todos los casos. El significado de esta coincidencia implica que la sencillez de la aproximación

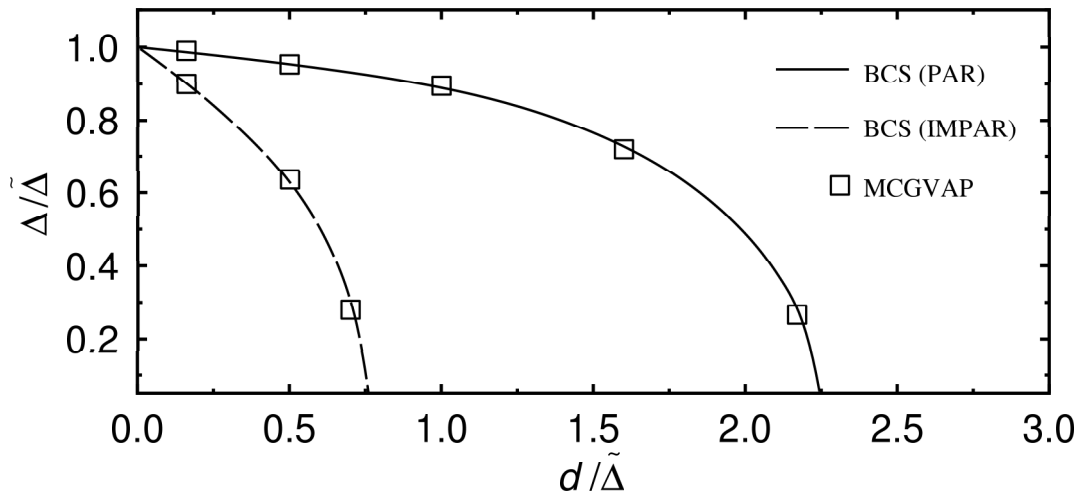


Figura 9.5: El parámetro  $\Delta$  como función del espaciado  $d/\tilde{\Delta}$  y el correspondiente *gap* más probable correspondiente a la aproximación MCGVAP.

BCS, a pesar de proporcionar una energía de condensación mala (con la excepción del régimen de fuerte acoplo) es capaz de predecir los valores de  $\Delta$  más probables de la aproximación MCGVAP, la cual si proporciona energías de condensación exactas. En este sentido podemos entender el estado (8.4) como un *Ansatz* BCS generalizado.

### 9.3.5. Conclusiones

En conclusión, hemos adaptado el *Ansatz* BCS generalizado (8.4) dentro del contexto del método de la coordenada generadora (MCG) para tratar con algunas propiedades que caracterizan a los granos superconductores.

Hemos usado el hamiltoniano reducido BCS (4.1) como modelo de interacción de apareamiento. Hemos comprobado que para la elección de la coordenada generadora  $\xi = \Delta$  el MCG en la aproximación MCGVAP reproduce los resultados exactos de la solución de Richardson. De esta forma podemos concluir en esta sección de resultados previos que el MCG así formulado, y dado su versatilidad y facilidad numérica se convierte en una herramienta idónea para el estudio en sistemas finitos dominados por la interacción de apareamiento.

## 9.4 Resultados globales

En la sección anterior hemos usado el MCG para describir algunas propiedades referentes a los granos superconductores comparándolo con el resto de aproximaciones y con la solución exacta. En este capítulo nos proponemos extender estos resultados. Por un lado implementaremos las elecciones restantes de la coordenada generadora y miraremos con más detalle algunas de las peculiaridades numéricas del MCG.

En particular haremos el estudio con el MCG usando las coordenadas generadoras  $\xi = \mu$ ,  $\xi = \Delta N^2$  y por completitud también volveremos a mostrar para facilitar la comparación los resultados

usando  $\xi = \Delta$ .

### 9.4.1. Estudio de la coordenada generadora

Sin duda, la calidad en la elección de la coordenada generadora reside en los autoestados de la ecuación de Hill-Wheeler. Sin embargo es bueno poder tener una visión más cercana del espacio de Hilbert generado por las respectivas coordenadas generadoras. Los elementos diagonales de las matrices  $\mathcal{H}_{\xi\xi}/N_{\xi\xi}$  forman las curvas de energías totales proyectadas  $E_N(\xi)$ . Esta cantidad está relacionada con las energías de condensación a través de la expresión

$$E_C(\xi) = E_N(\xi) - E_F \quad (9.15)$$

Siendo  $E_F$  la energía descorrelacionada del mar de Fermi. El objetivo es estudiar estas curvas como función de la coordenada generadora  $\xi$  y el número de partículas cubriendo así todo el rango desde la región de débil hasta fuerte apareamiento. Por simplicidad haremos el análisis para un número de partículas pares y con la aproximación MCGPAV.

En la figura fig. 9.6 mostramos  $E_C(\xi)$  para los números de partículas 20, 40, 86, 172 y 400. Empecemos la discusión con la coordenada  $\xi = G_t$ . Es obvio que para cada número de partículas existe un valor  $G_c(N)$  perteneciente al rango de  $G_c$  de tal forma que no existe solución superconductora por debajo de ese valor  $G_c(N)$ . En el panel a) se muestran las energías de condensación respecto de  $G_t - G_c(N)$ . Como se puede observar encontramos un comportamiento parabólico, las parábolas se hacen más abiertas y el mínimo se desplaza hacia valores más grandes de  $G_t - G_c(N)$  conforme el número de partículas disminuye, este comportamiento es esperable, a menor número de partículas se necesita un valor más alto de la constante  $G$  par que el sistema se encuentre en fase superconductora. Las curvas en su desplazamiento se hacen más suaves cuando disminuye el número de partículas y en el caso  $N=20$  la curva es especialmente suave. Además encontramos que el valor de la energía de condensación en el mínimo es más grande en valor absoluto conforme el número de partículas aumenta, algo que también es esperable.

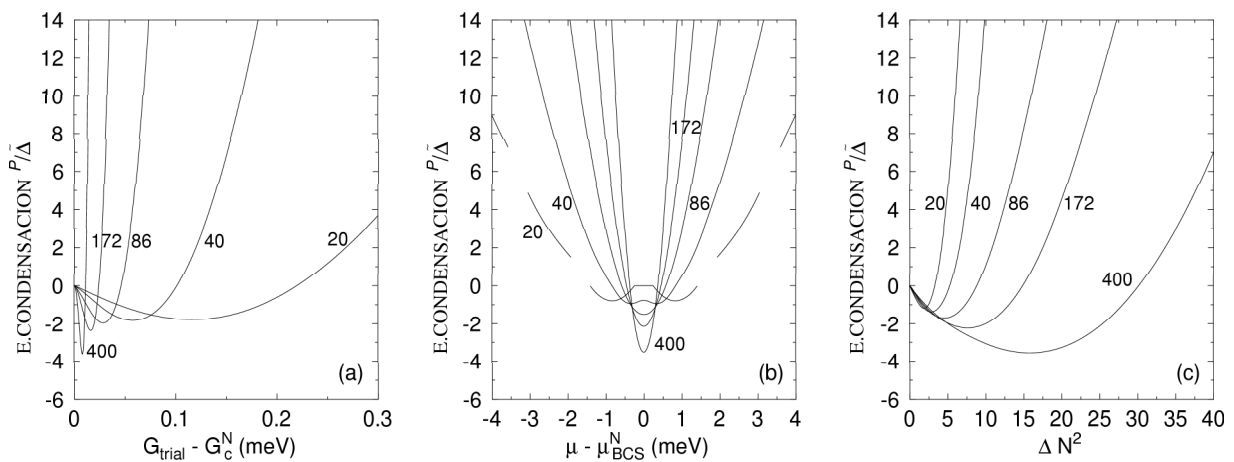


Figura 9.6: Energías de condensación proyectadas, en unidades de  $\tilde{\Delta}$ , como función de las diferentes coordenadas generadoras en la aproximación PAV.

$N$	20	40	86	172	400
$G_{trial}$	-1.7716	-1.8194	-1.9053	-2.3566	-3.4192
$\mu$	-0.7864	-0.9272	-1.4925	-2.0392	-3.4625
$\Delta N^2$	-1.1438	-1.3654	-1.6906	-2.2227	-3.5564
VAP	-2.0625	-2.2441	-2.4015	-2.5428	-3.6551
exacta	-2.2026	-2.5284	-2.9403	-3.5322	-4.8891

Tabla 9.1: Energías de condensación, en unidades de  $\tilde{\Delta}$ , predichos por las aproximaciones PAV, VAP y cálculos exactos.

En el panel b) mostramos la energías de condensación para la elección  $\xi = \mu$ , de modo que  $E_C(\mu)$  es representada respecto a  $\mu - \mu_{BCS}$ , siendo  $\mu_{BCS}$  el potencial químico que se obtiene al resolver las ecuaciones BCS para cada caso individual. En virtud de la simetría partícula-hueco del modelo la substracción de la cantidad  $\mu_{BCS}$  produce que las curvas queden simétricas alrededor de  $\mu - \mu_{BCS} = 0$ . Es importante hacer notar desde ahora que en este caso el número que acompaña a cada curva (20, 40,...) corresponde al número de niveles y no al número de partículas del estado  $|BCS(\mu)\rangle$ . Esto es así porque ahora no trabajamos con la condición de ligadura para el número de partículas y en general ya no tenemos  $\langle BCS(\mu)|\hat{N}|BCS(\mu)\rangle \neq N$ . Por otro lado como quiera que estamos proyectando sobre el número de partículas los estados  $|BCS(\mu)\rangle_N$  si corresponden a un sistema con N partículas.

Si nos concentramos en las curvas observamos que para los valores más grandes del número de partículas obtenemos curvas muy semejantes a parábolas que se suavizan conforme disminuye el número de partículas. En particular para  $N \geq 40$  encontramos soluciones superconductoras para todos los valores de  $\mu$ . Sin embargo este no es el caso para  $N=20$  donde para ciertos intervalos de  $\mu$  no obtenemos ninguna solución para la ecuación BCS. Esto no es sorprendente porque la ecuación autoconsistente BCS no provee una solución correlacionada en este caso, más abajo se discutirá con más detalle.

Por último en el panel c) la energía de condensación para el número de partículas. Las energías de condensación se hacen más suaves con mayor número de partículas. Esto es de esperar pues a mayor número de partículas mayor es el grado en la incertidumbre del número de partículas.

Miremos ahora los mínimos globales de las diferentes coordenadas. Es evidente que estos mínimos suponen una aproximación a un cálculo PAV sin ligaduras. En la tabla 9.1 hemos resumido los mínimos de las parábolas también como los valores proyectados PAV y los exactos. Encontramos que todas las aproximaciones realizan una buena aproximación para un gran número de partículas y grandes diferencias aparecen para un pequeño número de partículas, es decir, en el régimen débilmente correlacionado. En general encontramos a este nivel que el método con la coordenada  $G_t$  es el más efectivo seguido por el método con  $\Delta N^2$  y por  $\mu$ . Hasta aquí esto no tiene mayor significado porque la ecuación de Hill-Wheeler (mezcla de configuraciones) cambiará los resultados.

Analicemos ahora los estados generados con las diferentes coordenadas generadoras. Para un valor dado de la coordenada  $\xi$ , digamos  $\xi_0$ , éste corresponde a un estado  $|BCS(\xi_0)\rangle$ . Una for-

ma sencilla para caracterizar el contenido físico de tal estado es asociar el parámetro de orden  $\Delta(\xi_0) = G \sum_k u_k(\xi_0)v_k(\xi_0)$ .

En la fig. 9.7 hemos representado el parámetro  $\Delta(\xi)$  asociado a cada estado como función de la coordenada  $\xi$  usada para generarlo. En el panel a) mostramos los resultados para la coordenada  $G_t$ . Está claro que la constante  $G$  que participa en el cálculo de  $\Delta$  es la original del Hamiltoniano de apareamiento independientemente de la constante  $G_t$  usada en los cálculos. Teniendo en cuenta la expresión de  $\Delta$  es esperable que, en primera aproximación, se observe un comportamiento lineal con  $G_t$ , y eso es lo que encontramos. En general un rango muy ancho de parámetros  $\Delta$  está cubierto, ésta es la razón por la que podemos considerar a la coordenada  $G_t$  equivalente a la coordenada  $\Delta$ .

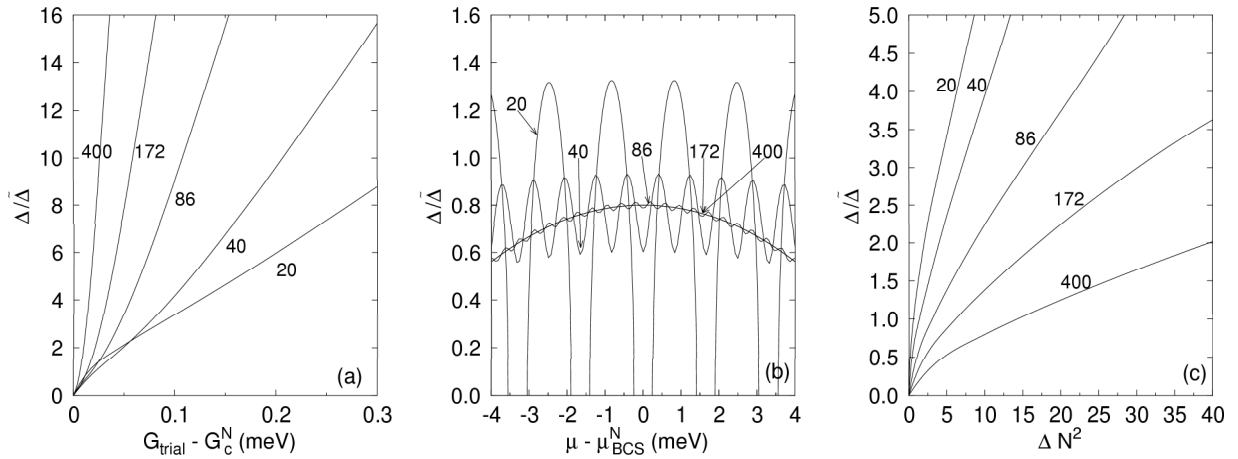


Figura 9.7: Dependencia del parámetro de orden  $\Delta$  con las diferentes coordenadas generadoras  $G_{\text{trial}}$ ,  $\mu$  y  $\Delta N^2$ . En la gráfica (b) la escala del eje de ordenadas es aplicable sólo para  $N = 20$ , para  $N = 40$  el eje de ordenadas cubre el intervalo 0.6-1.4 y para  $N = 86, 172$  y  $N = 400$  el intervalo es 0.9-1.1.

El caso de la coordenada  $\mu$  se muestra en el panel b), donde representamos el parámetro  $\Delta$  correspondiente como función de  $\mu - \mu_{\text{BCS}}$ . Encontramos un movimiento oscilatorio de  $\Delta$  como función de  $\mu$  debido a la simetría del modelo. Notemos que la escala de las ordenadas depende del número de partículas considerado (ver el pie de la figura).

Para los valores  $\mu = kd$ , en los valores de partícula individual  $\epsilon_k$  encontramos un máximo y para los que son de la forma  $\mu = k(d + 1/2)$  encontramos un mínimo. El período y la amplitud de las oscilaciones decrecen conforme aumenta el número de partículas pues para este modelo se tiene  $d \sim 1/N$ . Para  $N \geq 40$  obtenemos soluciones superconductoras para todos los valores de  $\mu$ , en particular para  $\mu = \mu_{\text{BCS}}$ , es decir para la ecuación autoconsistente BCS. Para  $N = 20$ , sin embargo, que alrededor y en los puntos  $\mu = k(d + 1/2)$  no obtenemos estados correlacionados. Como comentamos anteriormente este comportamiento está en acuerdo con el hecho de que las soluciones BCS no poseen solución superconductoras para este caso.

Esta situación es ilustrada en la figura fig. 9.8 para el caso  $N = 20$ . En el régimen de apareamiento débil encontramos solamente soluciones para valores  $\mu$  correspondientes a las regiones sombreadas alrededor de un nivel dado. En la región alrededor del nivel  $k$ , el número de partículas del estado BCS, esto es, el valor esperado  $\langle \text{BCS}(\mu) | \hat{N} | \text{BCS}(\mu) \rangle$  varía de forma continua desde

$2(k - 1)$  hasta  $2k$ . Por ejemplo, para el caso  $N = 20$ , es decir, para  $k = 10$ , el estado BCS alrededor del nivel 10 tiene un número de partículas en promedio en un rango de 18 a 20. En general de estos estados es siempre posible proyectar a un número de partículas igual a 20. En las regiones entre medias de las sombreadas no se encuentra ninguna solución BCS, sólo la solución Hartree-Fock.

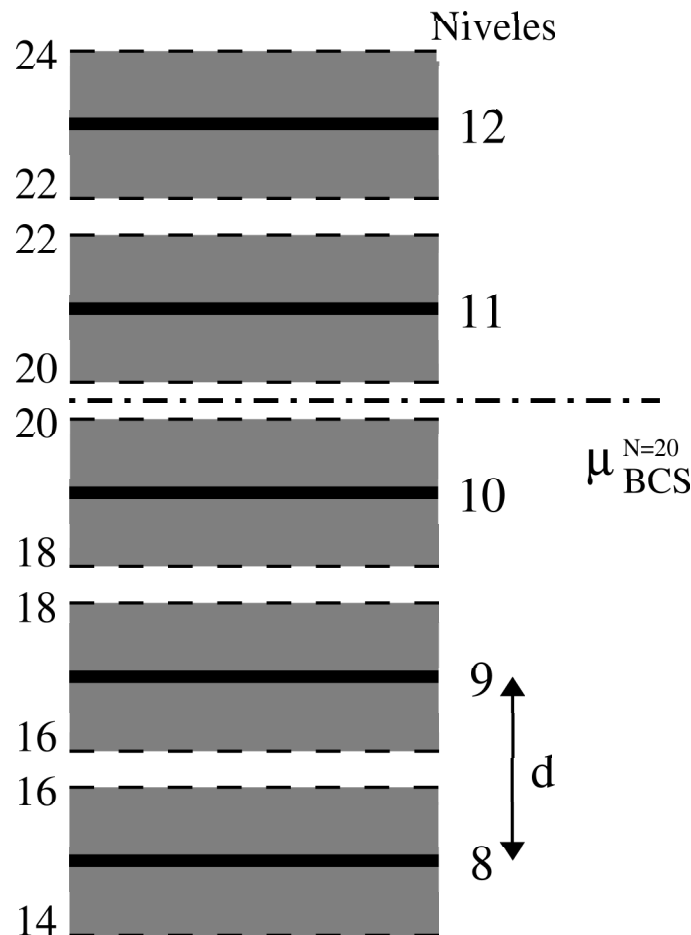


Figura 9.8: Representación de las zonas de apareamiento fuerte y débil para  $N = 20$ . Los números en la parte derecha corresponden a los niveles mientras que los de la parte izquierda indican los valores promedio del número de partículas de la función de onda BCS. Se indica también el correspondiente potencial químico  $\mu$ .

El número de partículas es un número entero obviamente, en el ejemplo que hemos mostrado los enteros son 16,18,20 y 22. Para proyectar a 20 partículas estos estados Hartree-Fock sólo es posible para 20, en los otros casos la función de onda es nula. Este hecho explica la curva correspondiente a  $N = 20$  en la fig. 9.7. Desde todas las regiones donde no se encuentra solución BCS, sólo la que se encuentra entre  $k = 10$  y  $k = 11$ , correspondiendo a una solución Hartree-Fock con 20 electrones es la que sobrevive. En la fig. 9.8 esta región está representada por la línea recta alrededor de  $\mu = \mu_{BCS}$ . Para  $N \geq 40$  este no es el caso y siempre encontramos solución BCS. Las regiones sombreadas de la fig. 9.8 corresponde en este caso a las fuertes correlaciones y las regiones blancas a las más débiles.

Finalmente, en el panel c) se muestra el parámetro  $\Delta$  con respecto a la coordenada genera-



dora  $\Delta N^2$ . El comportamiento es de nuevo lineal, como para la coordenada  $G_t$ , pero el rango del parámetro  $\Delta$  en cada estado es el opuesto. En este caso obtenemos para un número de partículas pequeño un rango mucho más amplio que para un número de partículas grande.

## 9.5 Detalles a la solución numérica de ecuación de Hill-Wheeler

Cuando presentamos el método de la coordenada generadora en el capítulo 7 dimos las pautas de cómo solucionar numéricamente la solución de Hill-Wheeler. Ahora veremos los detalles numéricos de esas ecuaciones en el caso que estamos estudiando.

Resolver la ecuación de Hill-Wheeler es equivalente a la diagonalización del Hamiltoniano en la base no ortogonal de los estados generadores  $|BCS(\xi)\rangle_N$ . El procedimiento usual consiste en dos diagonalizaciones sucesivas. En un primer paso, la matriz de la norma  $\mathcal{N}_{\xi\xi'}$  se diagonaliza:

$$\int d\xi' \mathcal{N}_{\xi\xi'} u_k(\xi') = n_k u_k(\xi). \quad (9.16)$$

Siendo las funciones  $u_k(\xi)$  formando un conjunto ortonormal completo en el espacio de las funciones  $f(\xi)$ . Sus autovalores no son nunca negativos  $n_k \geq 0$ , porque la matriz  $\mathcal{N}$  es definida positiva. Mantendremos los  $u_k(\xi)$  con autovalores no nulos correspondiendo a los estados linealmente independientes. En la práctica y debido a razones numéricas restringiremos los  $u_k(\xi)$  a aquellos con autovalores mas grandes que la tolerancia  $\epsilon$ . Para cada una de estas funciones existen estados  $|k\rangle$ ,

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_k}} \int d\xi u_k(\xi) |BCS(\xi)\rangle_N, \quad (9.17)$$

los llamados estados naturales, que expanden un subespacio colectivo  $\mathcal{H}_C$ . En el segundo paso, el Hamiltoniano  $\hat{H}$  es diagonalizado en este espacio:

$$\sum_{k'} \langle k | \hat{H} | k' \rangle g_{k'} = E g_k \quad (9.18)$$

con

$$\langle k | \hat{H} | k' \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_k n_{k'}}} \int \int d\xi d\xi' u_k^*(\xi) \mathcal{H}_{\xi, \xi'} u_{k'}(\xi') \quad (9.19)$$

La solución de la ecuación de Hill-Wheeler provee un conjunto de estados:

$$|\Psi\rangle = \sum_{k, n_k \neq 0} g_k |k\rangle, \quad (9.20)$$

con energías  $E$  etiquetadas por el índice  $\sigma$ , el más bajo corresponde al estado fundamental y los otros a los estados excitados. Por ahora estamos solamente interesados en el estado fundamental.

Como los estados  $|BCS(\xi)\rangle_N$  no son ortogonales, las funciones  $f(\xi)$  no pueden interpretarse como una amplitud de probabilidad.

Para propósitos numéricos toda las expresiones que contienen integrales tienen que ser reemplazadas por sumas discretizando el espacio  $\xi$ , es decir, pasando de la variable continua  $\xi$  al conjunto discreto  $\{\xi_j\}$ . De esta forma uno trabaja con ecuaciones matriciales mucho más fácil de manejar. La cuestión fundamental que se plantea es cómo determinar el espaciado óptimo en la coordenada  $\xi$  para realizar los cálculos.

Los valores extremos de  $\xi$  están determinados por argumentos energéticos basándose en la premisa de que la mezcla de estados energéticos altos es muy pequeña. Los intervalos de la coordenada  $\xi$  usados en los cálculos están dados en la tabla 9.2.

Los cálculos dependen además de la separación entre dos puntos sucesivos  $\xi_j$  y  $\xi_{j+1}$ , es decir, la distancia usada en la discretización. Este parámetro debe ser cuidadosamente seleccionada en cada caso, y no existe una regla general para saber de antemano el espaciado óptimo. Sin embargo, si sabemos que debe ser la mayor distancia posible en la cual estén incluidos todos los estados con la información relevante. Por otro lado este parámetro está íntimamente relacionado con la precisión requerida en el cálculo. La mejor estrategia consiste en estudiar la energía obtenida en la solución de la ecuación de Hill-Wheeler como función del número de puntos y de su distancia y obtener de ahí las conclusiones.

N	20	40	86	172	400
$G_i(meV)$	0.44	0.18	0.07	0.03	0.01
$G_f(meV)$	0.80	0.30	0.17	0.06	0.04
$\mu_i(meV)$	-3.00	-2.00	-2.00	-1.00	-1.00
$\mu_f(meV)$	3.00	2.00	2.00	1.00	1.00
$\Delta N_i^2$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
$\Delta N_f^2$	8.00	12.00	16.00	16.00	32.00

Tabla 9.2: Valores iniciales y finales de las coordenadas generadoras usadas en los cálculos.

En la fig. 9.9 se muestra la evolución de la energía de condensación  $E_C$  como función del número de puntos usados en los cálculos. Se muestra asimismo para diferentes número de partículas y para las coordenadas  $G_i$ ,  $\mu$  y  $\Delta N^2$ . Observamos que el número de puntos  $\xi_j$  necesarios para la convergencia depende de la coordenada  $\xi$  y del número de partículas.

La coordenada  $G_i$  (panel superior) produce la mejor convergencia de los tres cálculos. Para número de partículas grandes encontramos una buena convergencia para un número relativamente pequeño de puntos. Para el caso de un número de partículas pequeño es necesario tener un número mayor de puntos para encontrar una convergencia razonable.

Para la coordenada  $\mu$  la situación es la opuesta, esto es, se encuentra la convergencia mucho antes para un número pequeño de partículas.

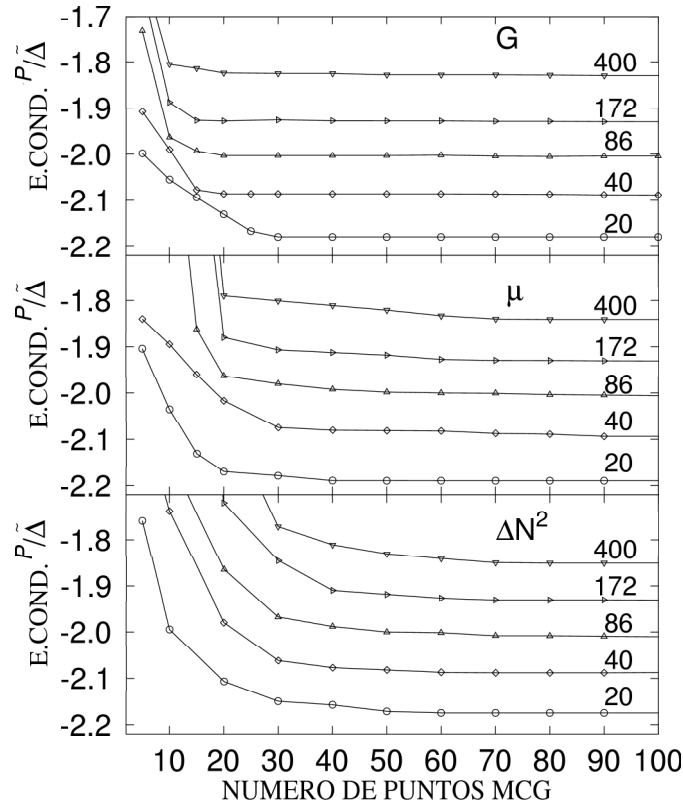


Figura 9.9: La energía de condensación en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las tres coordenadas generadoras como función del número de puntos usados en los cálculos. La escala de energía corresponde para  $N = 20$ , el resto de curvas han sido desplazadas para hacer la figura legible. Los desplazamientos son 0.28, 0.58, 1.02 y 2.48 para  $N = 40$ ,  $N = 86$ ,  $N = 172$  y  $N = 400$  partículas respectivamente.

El caso de la coordenada  $\Delta N^2$  es un caso que está entre medias de los dos anteriores.

Generalizando y en términos generales, encontramos que para un número aproximado de 80 puntos es suficiente para alcanzar una buena convergencia en todas las coordenadas. Y este es el número que usaremos en nuestras aplicaciones numéricas siguientes.

Otra alternativa para chequear la convergencia global es analizar el número de estados naturales  $|k\rangle$  que se mantienen en la base, es decir, los estados para los que  $n_k \neq 0$ . Recordemos que muchos de estos estados son linealmente dependientes algunos estados naturales  $|k\rangle$  poseen un solape de la norma nulo o despreciable, y éstos deben ser excluidos (ver capítulo 7). En todos nuestros cálculos solamente los estados con autovalores del solape de la norma mayores de una cierta tolerancia  $\epsilon$  son aceptados. Para un valor dado de la tolerancia escogemos tantos estados  $|k\rangle$  como necesitemos para obtener un buen *plateau*.

Analicemos el comportamiento de la energía como función del número de estados naturales mantenidos en la diagonalización de la ecuación de Hill-Wheeler o equivalentemente como función de la tolerancia en los cálculos. Esto se muestra en la figura fig. 9.10 para las tres coordenadas generadoras y para distinto número de partículas. En las coordenadas  $\mu$  y  $\Delta N^2$  encontramos que

para tolerancias menores de  $10^{-10}$  se tiene estados linealmente dependientes lo que provee de valores de la energía irreales. Lo interesante es que para tolerancias mayores se encuentra un buen plateau. La tolerancia de  $10^{-10}$  corresponde, típicamente, alrededor de 15 estados linealmente independientes, los cuales corresponden obviamente a estados excitados con una energía suficiente como para no afectar a la energía del estado fundamental. Dicha tolerancia asciende hasta 20 estados independientes. Desde este punto de vista concluimos que que si se está interesado en los estados excitados la coordenada  $G_t$  es la más efectiva que el resto.

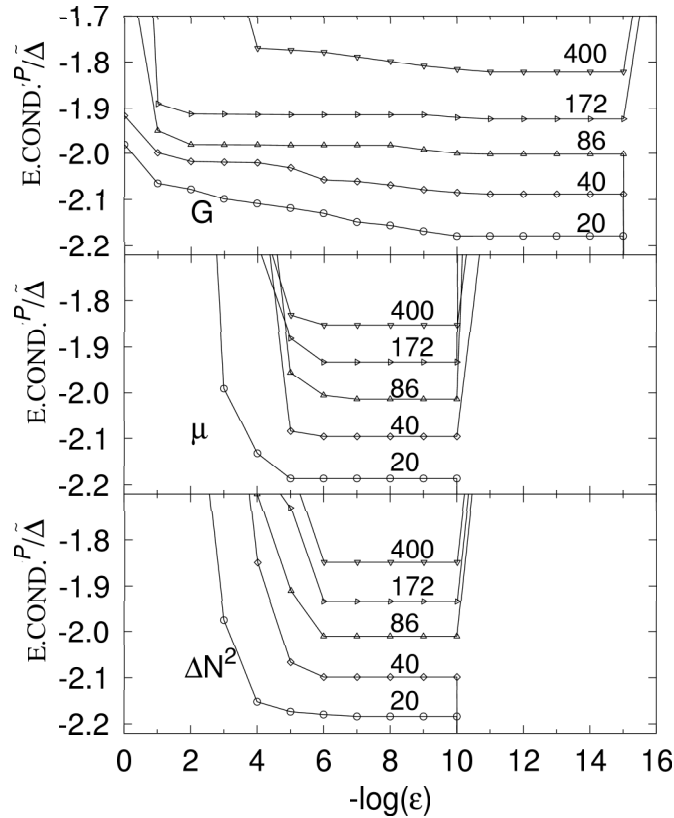


Figura 9.10: Idéntico a la fig. 9.9 pero como función de la tolerancia  $\epsilon$ .

La diagonalización de la ecuación de Hill-Wheeler merece algún comentario más para el caso de la coordenada  $\mu$ . Como fue comentado más arriba en el régimen de débil apareamiento, para un número de partículas igual a 20, por ejemplo, y para varios intervalos en el rango de  $\mu$  no se encuentran soluciones superconductoras. Esta circunstancia es la responsable de que en las curvas correspondientes a la energía de condensación muestren zonas inexistentes. Estas discontinuidades, sin embargo, no afectan a la solución de la ecuación de Hill-Wheeler, pues estos estados poseen autovalores nulos de la norma y no se mezclan con el resto de estados.

### 9.5.1. Aplicaciones a los granos superconductores

En esta parte presentamos un estudio sistemático de varias propiedades de los granos superconductores. Los resultados de los cálculos realizados con el MCG serán comparados con el resto de las aproximaciones, y la solución exacta.

### 9.5.2. Energías de condensación

Como dijimos en el capítulo anterior las energías de condensación delatan la presencia de correlaciones de apareamiento. En particular la transición entre el régimen claramente superconductor y el dominado por fluctuaciones cuánticas puede ser descrito a través de esta cantidad.

Como en todos los casos anteriores la energía de condensación es definida como la diferencia entre la energía total en la aproximación correspondiente y la energía del estado de Fermi descorrelacionado. Por ejemplo, en los cálculos MCG la energía de condensación está dada por  $E_C = E_{\sigma=0} - E_F$ .

Esta cantidad está representada en la figura fig.9.11 para sistemas con número par de electrones (hasta 600) y para sistemas con número impar (hasta 601), como función del número de partículas  $N$ .

En ambas gráficas damos resultados numéricos para las aproximaciones discutidas en capítulos pasados, BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP. Los cálculos MCGPAV son presentados para las coordenadas  $G_i$ ,  $\mu$ , y  $\Delta N^2$  y para la aproximación MCGVAP se presentan para  $G_i$  y  $\Delta N^2$ .

Como sabemos la predicción gran canónica BCS para la energía de condensación predice la desaparición de las correlaciones de apareamiento en la región de pocas partículas para ambos sistemas. Por otro lado, la proyección BCS (PBCS) predice siempre energías de condensación negativas para todo número de partículas en ambos sistemas, pero la transición entre ambos regímenes sucede abruptamente, más acusado para el caso impar. Este artefacto no está presente en los cálculos MCG ni en la solución exacta. Incluso la aproximación simple MCGPAV predice un comportamiento suave en ambos sistemas. La aproximación más complicada MCGPAV, no sólo predice una transición suave sino que reproduce la solución exacta. Respecto de la aproximación MCGPAV encontramos que la coordenada  $\mu$  es la más efectiva de todas seguidas por la coordenada  $\Delta N^2$ . Paradójicamente los cálculos con la coordenada  $\mu$  resultan ser los más sencillos desde el punto de vista numérico.

La razón de por qué la coordenada  $\mu$  sea la más satisfactoria se deba probablemente a que el uso de esta coordenada tenga el momento de inercia correcto en el espacio *gauge* asociado con el operador  $\hat{N}$ . De hecho, esto fue demostrado por Peierls y Thouless [PT62] en el contexto de la invariancia traslacional y una aproximación VAP por la técnica de la doble proyección. En este trabajo mostraron que el parámetro correcto de inercia del movimiento colectivo asociado con el operador lineal del momento angular  $\hat{P}$  ( $\hat{N}$  en nuestro caso) se obtiene cuando las coordenadas son la posición ( $\phi$  en nuestro caso) y la velocidad ( $\mu$  en nuestro trabajo). Esto significa que la dinámica asociada con la ecuación de Hill-Wheeler tiene el buen parámetro de inercia. En la aproximación VAP uno siempre obtiene el óptimo parámetro de masa [RS80].

### 9.5.3. Correlaciones de apareamiento

Como sabemos en un sistema canónico el parámetro de orden BCS es idénticamente nulo. Por esta razón es necesario definir otra cantidad para caracterizar correlaciones de apareamiento en un estado con un número definido de partículas.

$$\bar{\Delta}_b = G \sum_k C_k \quad (9.21)$$

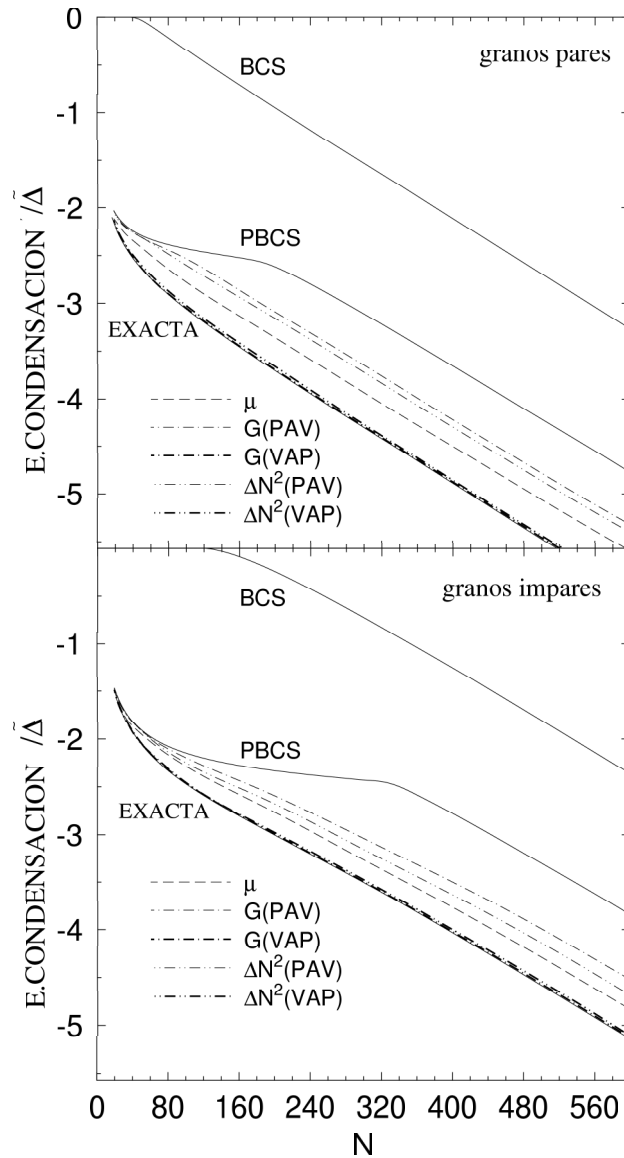


Figura 9.11: Energías de condensación como función del número de partículas en las diferentes aproximaciones y los resultados exactos. Parte superior (inferior) para sistemas pares (impares).

Donde la letra  $b$  etiqueta la paridad del sistema. Las cantidades  $C_k$  son los correladores que fueron introducidos en el capítulo anterior. Recordemos aquí que están definidos por:

$$C_k^2 = \langle c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle - \langle c_{k+}^\dagger \rangle \langle c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle \quad (9.22)$$

Estas cantidades miden las fluctuaciones en los números de ocupación. Los valores esperados deben ser calculados en cada una de las aproximaciones. En los apéndices se desarrollan las fórmulas correspondientes a cada aproximación. En un estado descorrelacionado o bloqueado se tiene  $C_k = 0$ . En el caso gran canónico los correladores se reducen a  $C_k = u_k v_k$  y  $\bar{\Delta}_b$  coincide con el parámetro de orden usual en la teoría BCS.

En la fig. 9.12 mostramos los resultados para el parámetro de apareamiento en unidades  $\tilde{\Delta}$  para

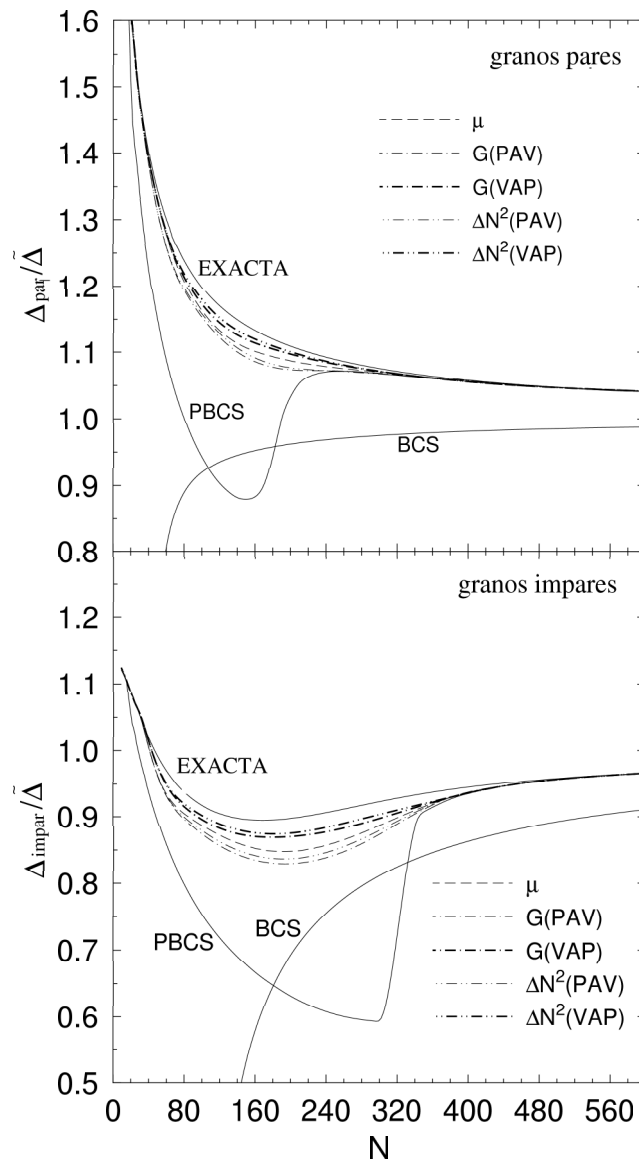


Figura 9.12: El parámetro  $\bar{\Delta}_b$  en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las diferentes aproximaciones como función del número de electrones para granos pares e impares. Para un número de electrones menor que los que se muestra en la curva BCS el parámetro  $\bar{\Delta}_b$  tiende a cero rápidamente.

el sistema par e impar. Como podemos ver en ambas gráficas la transición abrupta que ocurre en las aproximaciones BCS y PBCS está ausente en los cálculos MCG y en la solución exacta. Los comportamientos peculiares de  $\Delta_b$  en la aproximación MCG y la solución exacta antes y después de que la aproximación BCS se anule están relacionados con el cambio en la naturaleza de las correlaciones de apareamiento, es decir, desde un apareamiento deslocalizado en energía (régimen de débil acoplamiento) a uno localizado (régimen de fuerte acoplo). El decrecimiento rápido de  $\bar{\Delta}_b$  con  $N$  está relacionado con una característica especial del modelo, para el cual la constante de interacción  $G$  es inversamente proporcional al número de electrones.

El hecho de que  $\bar{\Delta}_b$  converja monótonamente al valor  $\tilde{\Delta}$  en el caso par por arriba y en el caso impar por debajo es debido al efecto del bloqueo. En estas gráficas observamos de nuevo que

la aproximación MCGVAP describe mejor el comportamiento del parámetro  $\bar{\Delta}_b$  que los cálculos MCGPAV.

#### 9.5.4. Funciones de onda colectivas

Miremos ahora a la estructura de los estados MCG en espacio de las variables colectivas  $\xi$ . Como sabemos las funciones  $f(\xi)$  no pueden ser interpretados como probabilidades. Son las funciones  $\mathcal{G}(\xi)$  de la ecuación las que juegan ese papel, son ortogonales entre ellas y sus módulos al cuadrado tienen el significado de probabilidad.

Las funciones  $|\mathcal{G}|^2$  se muestran en la fig. 9.13 como función de las coordenadas generadoras  $G$ ,  $\mu$  y  $\Delta N^2$  respectivamente. El comportamiento de  $|\mathcal{G}|^2$  como función de  $\xi$  indica cuales son las componentes más relevantes de los estados  $|\Psi\rangle$  en términos de la coordenada  $\xi$ . Para facilitar la lectura de las gráficas hemos incluido en la escala de las ordenadas la energía proyectada  $E_N(\xi)$ . Por simplicidad restringimos nuestra discusión a sistemas pares.

En la fig. 9.14 representamos estas cantidades para la coordenada  $G_t$  en las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP. Como quiera que las funciones  $|\mathcal{G}|^2$  no difieren cualitativamente podemos discutir las al mismo tiempo. El hecho de que las energías proyectadas sean menores en la aproximación PAV que en la VAP para un valor dado de  $G_t - G_c$  es debido al hecho de que la constante  $G_c$  es prácticamente cero para todos los números de partículas en la aproximación PAV mientras que varía considerablemente con el número de partículas para el caso VAP (ver tabla 9.2).

Como podemos ver, encontramos curvas de energía potencial anchas para un número de partículas pequeño las cuales se van estrechando en función del número de partículas. Interesantemente, las energías potenciales para las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP son diferentes para un número de partículas pequeño y resultan similares para las más grandes. Respecto de las funciones de onda colectivas para  $N = 20$  obtenemos distribuciones muy anchas las cuales corresponden claramente a una situación de apareamiento débil dominado por fluctuaciones en el parámetro de orden  $\Delta$ , ver panel a) de la fig. 9.13.

Para  $N \sim 40$  encontramos que la extensión de las funciones de onda ha disminuido considerablemente pero presentan una distribución con dos picos, con el primero de ellos alrededor de una solución no superconductora y la otra alrededor de una superconductora. Para un número superior de partículas ( $N \sim 86, 172, 400$ ) las distribuciones presentan un único pico siendo el ancho de este pico más pequeño conforme el número de partícula aumenta. Mirando detenidamente la figura fig. 9.14 observamos que a gran número de partículas la distribución queda centrada alrededor de un valor muy cercano al del parámetro de orden  $\Delta$  en el límite termodinámico  $\bar{\Delta}$ .

Los resultados para la coordenada  $\mu$  se presentan en la fig. 9.14.

Para  $N = 20$ , en la zona de apareamiento débil, obtenemos un potencial plano con una forma la cual concuerda con la física discutida en la fig. 9.13. Las funciones de onda colectivas, están de acuerdo con las descripciones de las figuras Fig. 2b y 3, muestran un patrón oscilante con los máximos alrededor de  $\mu = kd$  y los mínimos  $\mu = k(d + 1/2)$ . La altura de los máximos decrece considerablemente para valores  $k$  diferente de 10 y 11, es decir, la función de onda colectiva está principalmente formada por la solución Hartree-Fock alrededor del nivel de Fermi y las componentes de  $N = 20$  de la solución BCS de los niveles por encima y debajo del nivel de Fermi. Para



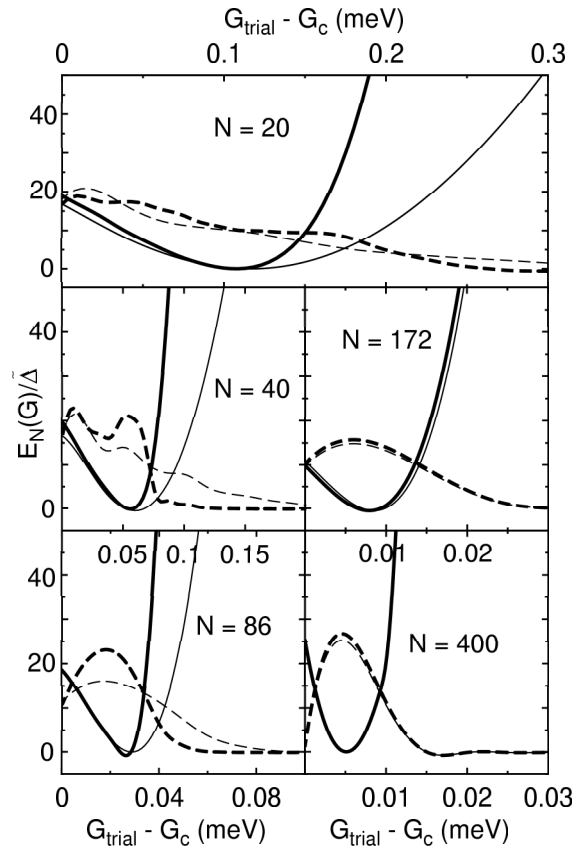


Figura 9.13: Las energías proyectadas  $E_N(G)$  en función de  $G$  en las aproximaciones MCGPAV (líneas continuas delgadas) y MCGVAP (líneas continuas gruesas) para sistemas pares. Las funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  para las aproximaciones MCGPAV (líneas discontinuas delgadas) y MCGVAP (líneas discontinuas gruesas) en unidades arbitrarias. La escala vertical aplica para  $E_N(G)$ , el mínimo de  $E_N(G)$  en cada aproximación ha sido puesto igual a cero. La escala de más arriba es sólo para el panel con  $N = 20$ .

$N = 40$  el régimen de débil apareamiento sigue persistiendo y la función de onda muestra una estructura similar a la de  $N = 20$  pero con la interacción mucho más concentrada debido al hecho de que el espaciado de niveles decrece con el incremento del número de partículas. Para  $N = 86$  la estructura de doble pico es una reminiscencia de la región de débil apareamiento y para  $N = 172$  y  $400$  emerge una estructura de un sólo pico indicando la situación de apareamiento fuerte. Las curvas de energía potencial se hacen más profundas con el incremento de  $N$  y la situación del pico alrededor de  $\mu_{BCS}^N$  ocurre en la misma manera. Como se puede ver en la fig. 9.14 el rango del parámetro  $\Delta$  cubierto por las funciones de onda disminuye con el incremento de  $N$ .

Por último discutiremos la coordenada  $\Delta N^2$  en la fig. 9.15.

Las curvas de energía potencial son fáciles de entender. En el límite de pocas partículas la solución BCS no corresponde a una solución superconductora y en consecuencia  $\langle \Delta N^2 \rangle = 0$ . Por otro lado la aproximación BCS coincide con la solución exacta en el límite de gran número de partículas, en consecuencia  $\langle \Delta N^2 \rangle \gg 1$ .

En acuerdo a esto esperamos mínimos de la energía proyectada a pequeños valores de  $\Delta N^2$  para

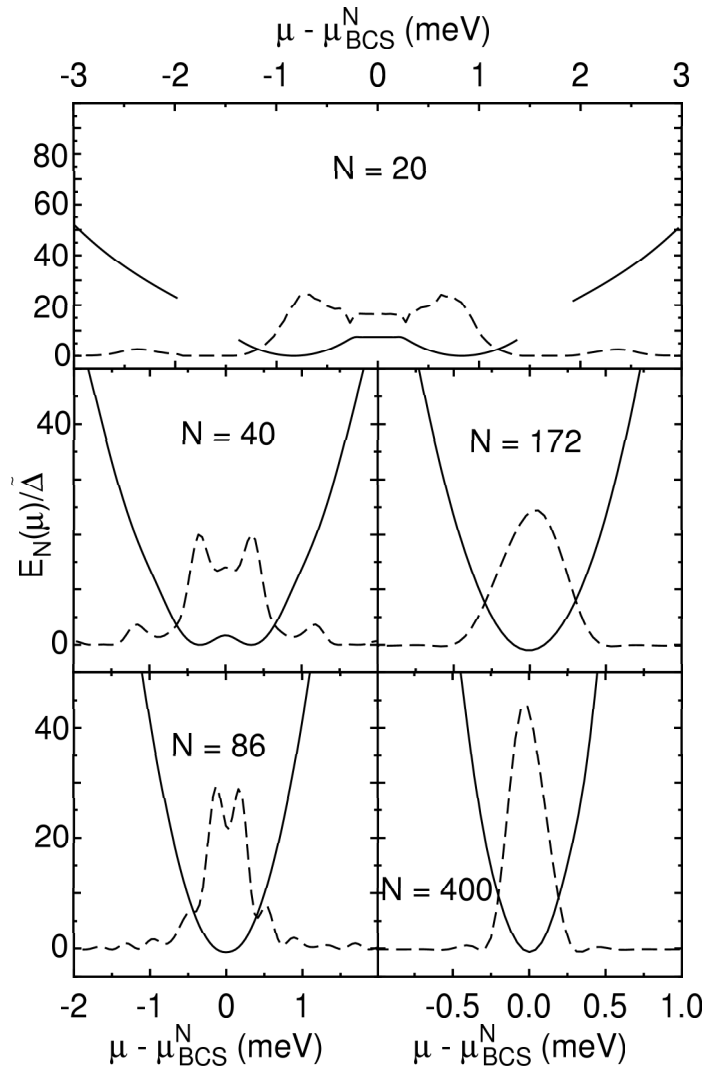


Figura 9.14: Las energías proyectadas  $E_N(\mu)$  (líneas continuas) y las funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(\mu)|^2$  (líneas discontinuas) resespecto de  $\mu$ . La escala vertical aplica para  $E_N(\mu)$ , el mínimo de  $E_N(\mu)$  ha sido puesto igual a cero.  $|\mathcal{G}(\mu)|^2$  está en unidades arbitrarias. La escala de más arriba aplica para el panel correspondiente a  $N = 20$ .

bajo número de partículas y grandes valores de  $\Delta N^2$  para grandes  $N$ . Las curvas de energía potencial se hacen más suaves con el aumento de  $N$  porque para incrementar  $\Delta N^2$  es energéticamente más fácil cambiar este valor. Como debe ser la curva de energía potencial para la aproximación MCGVAP está por debajo de MCGVAP. Respecto de las funciones de onda colectivas, sus comportamientos siguen la formas de los pozos de potencial. Para  $N \leq 86$  existe una probabilidad finita de tener una función descorrelacionada de Hartree-Fock como una componente de la función de onda colectiva y sólo para  $N \geq 172$  obtenemos funciones del tipo Wigner con amplitud nula para la componente Hartree-Fock. El rango de  $\Delta$ 's cubierto para las funciones de onda puede ser leído de la figura 2c.

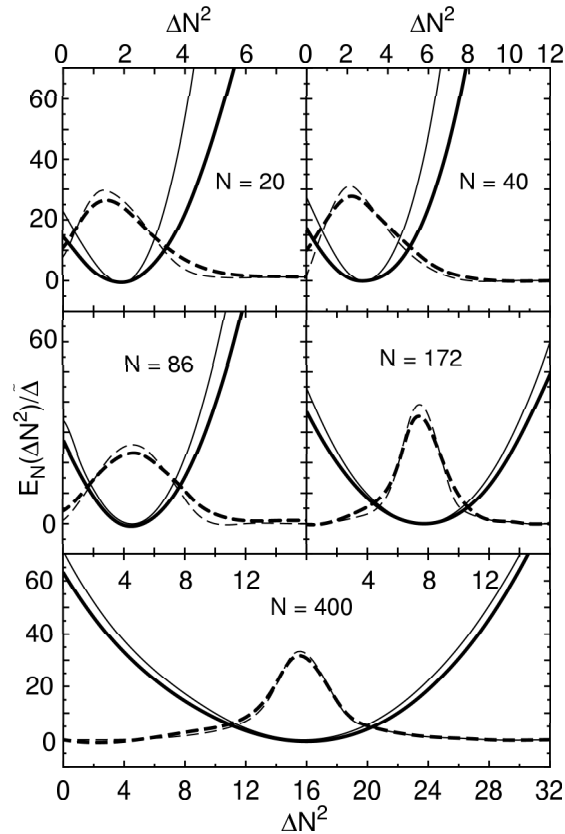


Figura 9.15: Lo mismo que la fig. 9.14 pero para el parámetro  $\Delta N^2$ .

## 9.6 Conclusiones

En este capítulo hemos presentado la formulación más detallada de la aproximación basada en la proyección al número de partículas empleando el método de la coordenada generadora. Hemos discutido tres coordenadas diferentes para generar funciones de onda, dos de ellos válidos para la proyección después de la variación y tres para la variación antes de la proyección. La teoría ha sido aplicada para estudiar el contexto de los granos superconductores usando el Hamiltoniano de Pairing reducido. Hemos mostrado que los cálculos basados en la aproximación MCGPAV con las dos coordenadas propuestas reproducen los resultados exactos en el régimen de débil y fuerte apareamiento así como en la transición.

Respecto de los cálculos MCGPAV encontramos que las tres coordenadas propuestas, a pesar de ser incapaces de reproducir los resultados exactos, describen de forma cualitativa la física correcta no reflejándose ningún indicio de transición de fase encontrada usando las aproximaciones BCS y PBCS. Respecto del grado de precisión encontramos que la coordenada  $\mu$  es la más efectiva de todas seguida por la coordenada  $\Delta N^2$ .

Pensamos que estos resultados son muy generales y se aplican a muchos otros sistemas más complejos que el simple Hamiltoniano de apareamiento. Como quiera que el método MCG incluye explícitamente fluctuaciones en las funciones de onda es muy apropiado para tratar sistemas finitos donde las transiciones de fase toman lugar. El método, contrariamente a otras aproximaciones, se

## 9 *Desarrollos en teorías de muchos cuerpos para sistemas superconductores finitos*

---

aplica igualmente igual a sistemas con pocas o muchas partículas. Por otro lado el ansatz MCG es muy versátil para ser adaptado a otras situaciones físicas considerando coordenadas adicionales a las discutidas aquí.

## CORRELACIONES DE APAREAMIENTO. HAMILTONIANO GENERALIZADO DE APAREAMIENTO

### 10.1 Introducción

Hasta ahora hemos usado en nuestras aplicaciones el sencillo hamiltoniano de apareamiento reducido (4.1), cuya principal cualidad es la de poseer como interacción una constante que afecta a todos los niveles electrónicos por igual. Basados en los excelentes resultados que ofrece el método de la coordenada generadora se impone extender el método a otras situaciones más generales que la tratada hasta ahora.

El paso natural para la generalización debe ser que la interacción de apareamiento no se reduzca a una constante sino que sea función de los estados. Es decir, que el hamiltoniano se escriba de la forma:

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \hat{n}_k + \sum_{kk'} V_{kk'} A_k^\dagger A_{k'} \quad (10.1)$$

siendo los operadores  $\hat{n}_k = \sum_m c_m^\dagger c_m$  el operador número y  $A_k = \sum_m c_m c_m$  ( $A_k^\dagger = (A_k)^\dagger$ ) los correspondientes operadores de destrucción, (creadores) de pares. El hamiltoniano (10.1) es el original hamiltoniano de apareamiento o hamiltoniano BCS.

Nuestro interés fundamental se centra en encontrar hamiltonianos basados en la interacción de apareamiento los cuales pueden resolverse exactamente, y poder así comparar nuestros métodos con la solución exacta. Desgraciadamente el hamiltoniano (10.1) no posee solución exacta, a menos que se diagolanice numéricamente. Esta forma de resolverlo sólo es asequible para un número pequeño de partículas haciendo inviable un estudio completo de la transición entre los regímenes de pocas y muchas partículas.

Sin embargo, recientemente se han encontrado un grupo de hamiltonianos basados en la interacción de apareamiento los cuales si poseen solución exacta. J. Dukelsky *et al.* [DES01] lograron encontrar tres familias basadas en la interacción de apareamiento las cuales poseen solución exacta. Estos modelos son aplicables tanto a fermiones como bosones y para cualquier dimensión. Su hallazgo fue una generalización previa del trabajo de M. C. Cambiaggio *et al.* [CRS97] en el cual se demostró que el hamiltoniano BCS reducido era integrable. Aunque M. C. Cambiaggio *et al.*

no facilitaron la solución exacta (desconocían el trabajo de Richardson) introdujeron para su demostración de integrabilidad un conjunto de operadores los cuales conmutaban entre sí y con el hamiltoniano. Esta fue la idea clave que permitió a J. Dukelsky *et al.* generalizar por un lado los operadores que encontraron M. C. Cambiaggio *et al.* y el método propuesto por Richardson para llegar a una nueva familia de hamiltonianos integrables, facilitando además la solución exacta para los mismo.

De forma paralela, la nueva generalización de las técnicas de Richardson permitió unificar otra familia de hamiltonianos (modelos de espines) integrables encontrada en 1976 por Gaudin [Gau76] y que fueron denominados Gaudin *magnets*. Se descubrió que existe una íntima relación entre ambos modelos, permitiendo un paralelismo completo entre ambos. La unificación de ambos modelos permite llegar a los llamados modelo de Richardson-Gaudin.

En este capítulo comenzaremos revisando los modelos de Richardson y Gaudin por separado, centrándonos en sus pruebas de integrabilidad. Posteriormente acabaremos con las aplicaciones de estos modelos confrontándolas con el MCG.

### 10.2 Los modelos de Richardson-Gaudin

#### INTRODUCIR REVIEW OF MODERN PHYSICS: RICHARDSON-GAUDIN MODELS

En la física de la materia condensada es conocido la existencia un grupo de modelos con solución exacta, que en general han sido usados en sistemas de una dimensión. Estos modelos se clasifican básicamente en tres familias:

la primera de ellas es la que corresponde al trabajo desarrollado por Bethe [Bet31] y su Ansatz para dar solución al modelo de Heisenberg. La segunda de las familias corresponde a los modelos llamados Tomonaga-Luttinger [Tom50, Lut63], cuya aplicación se realiza fundamentalmente sobre los llamados líquidos de Luttinger. La tercera familia nació con los trabajos de Calogero [Cal62] y Sutherland [Sut71], estos modelos con interacciones de largo alcance y han sido aplicados a una gran variedad de sistemas, desde espines, electrones en una dimensión y efecto Hall cuántico.

También existen modelos que pueden ser resueltos exactamente en el contexto de Física Nuclear. Un ejemplo de ello es el modelo de Elliot [Ell8a, Ell8b] que describe deformación nuclear y el movimiento rotatorio asociado. Otros ejemplos son los propuestos por Iachello y Arima [Ia80] basados en el grupo  $U(6)$  el cual a su vez dependiendo del límite que se considere puede describir distintas situaciones físicas como por ejemplo pueden ser las rotaciones  $SU(3)$ , las vibraciones  $U(5)$  y las inestabilidades gamma  $O(6)$ . Estos modelos, todos ellos exactamente solubles han sido usados ampliamente para describir estos complejos fenómenos nucleares.

Respecto de lo que para nosotros es interesante aquí, el fenómeno de la superconductividad, es de especial importancia en ambos contextos, tanto en materia condensada como en física nuclear. Como sabemos el uso de la teoría BCS no es satisfactoria cuando el tamaño del sistema es muy pequeño, la violación de la simetría del número de partículas hace que la teoría sea inaplicable en tales sistemas. En consecuencia es necesario ir más allá, una posibilidad es usar la teoría proyectada para restaurar la simetría del número de partículas muy usada en aplicaciones nucleares pero

insatisfactoria como sabemos en aplicaciones en los granos superconductores. Una alternativa es usar otros métodos que generan más correlaciones. Una posibilidad es usar el DMRG [Whi92] y otra es usar la que nosotros proponemos, el método de la coordenada generadora MCG.

En este contexto es donde se desarrollaron las soluciones exactas para el Hamiltoniano de apareamiento, publicadas en una serie de trabajos por Richardson [RS64, Ric65, Ric66, Ric77] e independientemente por Gaudin [Gau76], que redescubrió estos modelos que han sido aplicados satisfactoriamente en el contexto de los granos superconductores [BvD98, BvD99b, DS99, DS00, FE03], para un review reciente consultar [BvD99a]. Es notable que a pesar de que los trabajos originales de Richardson fueran escritos en la década de los 60, hayan sido usados recientemente con tanto ímpetu.

Ahora sabemos que la solución que proporcionó Richardson contiene una muy importante conexión con los modelos de espines *magnet* de Gaudin. Dicha conexión reside tiene los orígenes en un trabajo de Cambiaggio, Rivas y Saraceno [CRS97] los cuales fueron capaces de construir un conjunto de operadores que conmtaban entre sí y con el hamiltoniano de apareamiento reducido, demostrando así que es integrable. Pudiendo escribir es hamiltoniano de apareamiento como una combinación lineal de constantes del movimiento cuánticas. Lo importante de esta situación reside en que es posible establecer una relación entre las constantes del movimiento del modelo de apareamiento y aquellas del modelo de Gaudin. De esta forma el modelo de apareamiento se extiende a tres familias de hamiltonianos basadas en la interacción de apareamiento, las cuales son integrables tanto para sistemas fermiónicos como bosónicos. En este capítulo veremos cómo se obtienen estas familias.

### 10.2.1. La solución exacta de Richardson del modelo de apareamiento

En los sistemas finitos, la interacción de apareamiento es la responsable de la manifestación de los efectos superconductores. Un ejemplo de ello, es como sabemos, los granos superconductores, los núcleos atómicos son otro. Los mecanismos microscópicos causantes de tales interacciones poseen orígenes que dependen del sistema físico considerado. Por ejemplo, en materia condensada, los efectos superconductores se inducen entre el intercambio de fonones entre los electrones de conducción. En la física nuclear, se desprende a partir de la naturaleza de pequeño alcance de la interacción efectiva entre nucleones dentro del medio nuclear. Pero ambos sistemas (núcleos y metales) comparten una propiedad respecto de la interacción de apareamiento: los pares de partículas forman pares correlacionados formando estados inverso temporales uno del otro.

Consideremos ambos sistemas ahora desde este último punto de vista, y veamos como pueden ser estudiados siguiendo la solución de Richardson del modelo de apareamiento. Por el momento asumiremos que consideramos un sistema de  $N$  fermiones que se mueven en un espacio de  $\Omega$  sitios, que poseen una degeneración  $D_\Omega$ . Demos la libertad de que en cada uno de los sitios  $\Omega$  pueda estar caracterizado por un subespacio, el cual es etiquetado con los números cuánticos  $\ell$ . Asumimos que la degeneración  $D_\Omega$  es siempre par (para cada estado siempre existe su inverso temporal). El hamiltoniano de apareamiento se escribe como:

$$H = \sum_k \epsilon_k \hat{n}_k + \sum_{kk'} V_{kk'} A_k^\dagger A_{k'} \quad (10.2)$$

Los operadores  $\hat{n}_k$  y  $A_k^\dagger, A_k$  se definen como

$$\hat{n}_k \equiv \sum_{\ell} c_{k\ell}^\dagger c_{k\bar{\ell}} \quad A_k^\dagger \equiv \sum_{\ell} c_{k\ell}^\dagger c_{k\bar{\ell}}^\dagger \quad A_k = (A_k^\dagger)^\dagger \quad (10.3)$$

Los operadores  $c_{k\ell}^\dagger$  ( $c_{k\ell}$ ) crean (destruyen) una partícula en el estado  $k\ell$  ( $k\bar{\ell}$ ) respectivamente. El operador  $\hat{n}_k$  es el operador número y el operador  $A_k^\dagger$  ( $A_k$ ) crean (destruyen) pares. Este conjunto de operadores obedece al siguiente álgebra de conmutadores

$$[\hat{n}_k, A_{k'}^\dagger] = 2\delta_{kk'} A_{k'}^\dagger, \quad [A_k, A_{k'}^\dagger] = 2\delta_{kk'} (D_k - 2\hat{n}_k). \quad (10.4)$$

El hamiltoniano general formado por estos operadores (10.2) ha sido el usado en los capítulos precedentes, con la simplificación  $V_{kk'} = G/2$  (notemos que ahora la constante es  $G/2$ ), es decir el modelo reducido de apareamiento. Cuando la constante  $G$  es positiva, la interacción es repulsiva, y cuando es negativa, la interacción se hace atractiva.

$$H_P = \sum_k \epsilon_k \hat{n}_k + G \sum_{kk'} A_k^\dagger A_{k'}. \quad (10.5)$$

Es necesario considerar una cota superior para los estados  $k$  en el espacio de partículas individuales. En la materia condensada este límite está dado por la frecuencia de Debye de los fonones. En la física nuclear, la elección de el límite superior depende del núcleo tratado y de los estados disponibles para que la interacción tenga lugar.

Construyamos ahora el estado más general posible de  $n_0$  pares de fermiones y  $\nu$  partículas desapareadas, este estado es escrito de la forma:

$$|n_1, n_2, \dots, n_\Omega, \nu\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} (A_1^\dagger)^{n_1} (A_2^\dagger)^{n_2} \cdots (A_\Omega^\dagger)^{n_\Omega} |\nu\rangle \quad (10.6)$$

siendo  $\mathcal{N}$  una constante de normalización. El estado desapareado  $|\nu\rangle = |\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_\Omega\rangle$ , con  $\nu = \sum_l \nu_l$  se define de tal modo que

$$A_l |\nu\rangle = 0, \quad \hat{n}_l |\nu\rangle = \nu_l |\nu\rangle \quad (10.7)$$

El número  $\nu$  define la senioridad del estado, es decir, dice cuantas partículas hay desapareadas en el sistema. El número total de pares es  $n_0 = \sum_l n_l$  y el número total de partículas  $N = 2n_0 + \nu$ .

Para valores grandes del espacio (valores  $\Omega$  y  $n_0$ ) es evidente que los métodos de diagonalización como el método de Lanczos no pueden usarse para obtener solución alguna, y es necesario usar algún método de resolución aproximado, un ejemplo es la teoría BCS. La solución de Richardson consiste en resolver exactamente el problema sin necesidad de realizar diagonalización alguna.



Resumamos aquí los pasos seguidos por Richardson para solucionar el problema de encontrar los autovalores y los autoestados del Hamiltoniano reducido de apareamiento (10.5). (Ver capítulo 6 para más detalles). Los autoestados pueden ser escritos de la siguiente forma:

$$|\Phi\rangle = B_1^\dagger B_2^\dagger \cdots B_{n_0}^\dagger |v\rangle \quad (10.8)$$

Los operadores  $B$ 's actúan sobre el colectivo de pares de electrones, la estructura de estos operadores son los que determinan la solución del problema. Richardson estableció que su forma está dado por la siguiente expresión:

$$B_\alpha^\dagger = \sum_k \frac{1}{2\epsilon_k - e_\alpha} A_k^\dagger \quad (10.9)$$

Si se considera un sólo par de partículas, entonces las cantidades  $e_k$  definen las energías de los pares. Con esa estructura, los operadores  $B$ 's determinan a partir de las cantidades  $e_k$  las autofunciones  $|\Phi\rangle$ .

Richardson tras laboriosas manipulaciones [RS64] llega a las siguientes conclusiones:

El estado (10.6) es un autoestado de  $H_P$  si las energías de pares  $e_\alpha$  son solución del conjunto de  $n_0$  ecuaciones no lineales acopladas, las llamadas ecuaciones de Richardson:

$$\frac{1}{2} - 4G \sum_k \frac{d_k}{2\epsilon_k - e_\alpha} + 4G \sum_{\beta(\neq\alpha)} \frac{1}{e_\alpha - e_\beta} = 0 \quad (10.10)$$

donde  $d_k = \nu_k/2 - D_k/4$  es una cantidad relacionada con la degeneración del nivel individual  $k$ .

El autovalor de la energía asociada con una solución para los pares de energía es

$$E = \sum_k \epsilon_k \nu_k + \sum_\alpha e_\alpha \quad (10.11)$$

Como vemos la solución de Richardson se limita a resolver el conjunto de ecuaciones (10.10), y puede ser aplicado a espacios de configuraciones verdaderamente grandes, muy por encima de cualquier método de diagonalización.

## 10.2.2. El modelo de Gaudin

Gaudin en 1976 [Gau76] inspirado por los trabajos de Richardson propuso una familia completa de modelos integrables y exactamente solubles modelos de espín. Los modelos de Gaudin están basados en el álgebra  $SU(2)$  de los operadores de espín,

$$[K^\alpha, K^\beta] = 2i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} K^\gamma \quad (10.12)$$

donde  $K^\alpha = \sigma^\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ) son las matrices de Pauli.

Un modelo cuántico con  $L$  grados de libertad es integrable si existen  $L$  operadores hermíticos que conmuten entre sí. Esta condición garantiza la existencia de una basa común de autoestados de los  $L$  operadores, que son los llamados invariantes cuánticos, y para sus autovalores, las constantes del movimiento.

El álgebra del grupo  $SU(2)$  tiene un sólo grado de libertad, de modo que el conjunto de  $L$  operadores que sean cuadráticos en los operadores de espín, son

$$H_i = \sum_{j(\neq i)}^L \sum_{\alpha=1}^3 w_{ij}^\alpha K_i^\alpha K_j^\alpha \quad (10.13)$$

donde las funciones  $w_{ij}^\alpha$  son  $3L(L-1)$  coeficientes reales. Para definir un modelo integrable, que satisfaga las relaciones de conmutación  $[H_i, H_j] = 0$ , estos coeficientes deben satisfacer el siguiente conjunto de ecuaciones algebraicas

$$w_{ij}^\alpha w_{jk}^\gamma + w_{ji}^\beta w_{ik}^\gamma - w_{ik}^\alpha w_{jk}^\beta = 0 \quad (10.14)$$

Gaudin propuso dos condiciones para resolver este sistema de ecuaciones, la primera fue la antisimetría de las funciones  $w$ ,

$$w_{ij}^\alpha = -w_{ji}^\alpha \quad (10.15)$$

Lo segundo fue expresar los coeficientes  $w$  como una función impar de la diferencia entre dos parámetros reales,

$$w_{ij}^\alpha = f_\alpha(\eta_i - \eta_j) \quad (10.16)$$

para satisfacer la ecuación (10.15).

La solución más general posible a las ecuaciones (10.14) sujeta a las condiciones (10.15) y (10.16) puede ser escrito en términos de funciones elípticas. Además de estas condiciones se suma la condición de que el espín total en la dirección  $z$   $S^z = \frac{1}{2} \sum_i K_i^z$ , se conserva, es decir, los operadores  $H_i$  conmutan con  $S^z$ . La conservación de esta cantidad requiere que  $w_{ij}^x = w_{ij}^y = X_{ij}$  y  $w_{ij}^z = Y_{ij}$ , en términos de las dos nuevas matrices  $X$  e  $Y$ . En tal caso, las condiciones de integrabilidad de la ecuación (10.14) se reducen a

$$Y_{ij}X_{jk} + Y_{ki}X_{jk} + X_{ki}X_{ij} = 0. \quad (10.17)$$

Existen tres familias de soluciones a las ecuaciones (10.17):

I) El modelo racional,

$$X_{ij} = Y_{ij} = \frac{1}{\eta_i - \eta_j}. \quad (10.18)$$

II) El modelo trigonométrico,

$$X_{ij} = \frac{1}{\sin \eta_i - \eta_j}, \quad Y_{ij} = \cot(\eta_i - \eta_j). \quad (10.19)$$

III) El modelo hiperbólico,

$$X_{ij} = \frac{1}{\sinh(\eta_i - \eta_j)}, \quad Y_{ij} = \coth(\eta_i - \eta_j). \quad (10.20)$$

Evitando dar los detalles de las derivaciones, se puede demostrar que la solución a estos modelos está basado precisamente en el mismo ansatz que el usado por Richardson en su solución del modelo de apareamiento. El Hamiltoniano más general con operadores de espín que puede ser escrito como combinación lineal de las operadores  $H_i$  es:

$$H = 2 \sum_i s_i H_i = \sum_{i \neq j} (s_i - s_j) \{X_{ij} [K_i^x K_j^x + K_i^y K_j^y] + Y_{ij} K_i^z K_j^z\}. \quad (10.21)$$

Este Hamiltoniano modeliza una cadena de espines con interacciones de largo alcance, tiene un total de  $2L$  parámetros libres. El caso racional conduce a un modelo de espín XXX, mientras que los casos trigonométricos e hiperbólicos corresponden al modelo XXZ. Los modelos de Gaudin tienen un enlace con el magnetismo cuántico, sin embargo estos modelos no han recibido mucha atención en nuestros días.

### 10.2.3. Integrabilidad del Hamiltoniano de apareamiento

Una conexión clara entre el modelo de Richardson y el de Gaudin no se realizó hasta que Cambiaggio, Rivas y Saraceno en 1997 publicaron su trabajo [CRS97].

La clave del trabajo fue mostrar que el hamiltoniano de apareamiento es integrable encontrando un conjunto de operadores hermíticos que conmutan entre sí y con el hamiltoniano, el cual pueda ser escrito como combinación lineal de ellos.

Evitando dar los detalles aquí, Cambiaggio y colaboradores consideró el siguiente conjunto de operadores

$$R_l = K_l^0 + 2G \sum_{l'(\neq l)} \frac{1}{\epsilon_l - \epsilon_{l'}} \left[ \frac{1}{2} (K_l^+ K_{l'}^-) + K_l^0 K_{l'}^0 \right]. \quad (10.22)$$

Donde los operadores  $K_l^\pm, K_l^0$  son los operadores elementales del álgebra de pares SU(2) definidos como

$$\begin{aligned} K_l^0 &= \frac{1}{2} \sum_m c_{lm}^\dagger c_{l\bar{m}} - \frac{1}{4} D_l \\ K_l^+ &= \frac{1}{2} \sum_m c_{lm}^\dagger c_{l\bar{m}}^\dagger = (K_l^-)^\dagger. \end{aligned} \quad (10.23)$$

Los operadores  $K_l^\dagger$  crean un par de fermiones en estados inverso temporales. La degeneración  $D_l$  del nivel  $l$  está relacionada con el pseudoespín  $S_l$   $D_l = 2S_l + 1$ . Los tres operadores  $K_l^\pm, K_l^0$  satisfacen el álgebra de conmutadores de  $SU(2)$

$$[K_l^0, K_{l'}^\pm] = \pm \delta_{ll'} K_l^\pm, \quad [K_l^+, K_{l'}^-] = 2\delta_{ll'} K_l^0. \quad (10.24)$$

El grupo  $SU(2)$  para un nivel  $l$  tiene un sólo grado de libertad y el operador de Casimir es

$$(K_l^0)^2 + \frac{1}{2}(K_l^+ K_l^- + K_l^- K_l^+) = \frac{1}{4}(D_l^2 - 1). \quad (10.25)$$

Demostraron que los operadores  $R_l$  eran hermíticos, globales (en el sentido de que son independientes del espacio de Hilbert), independientes (en el sentido de que no pueden ser expresados como función de los demás) y que conmutan entre sí. Por otro lado, obviamente existen tantos operadores  $R_l$  como grados de libertad. El conjunto de estos operadores cumple con los requisitos de un modelo integrable. Finalmente mostraron que el Hamiltoniano (10.5) puede ser escrito como una combinación lineal de los operadores  $R_l$  de la forma siguiente:

$$H_p = 2 \sum_l \epsilon_l R_l + cte. \quad (10.26)$$

Volvamos a la relación entre el modelo de Richardson y el de Gaudin. Esto puede realizarse comparando el modelo racional de Gaudin con los operadores encontrados por Cambiaggio, la diferencia entre ambos reside en que en el modelo racional de Gaudin no aparece un término a un cuerpo. Como mostró Cambiaggio este término preserva la conmutabilidad de los operadores  $R$  y en consecuencia generaliza el modelo racional de Gaudin.

## 10.2.4. Los modelos de Richardson-Gaudin generalizados

La generalización de los modelos de Richardson y Gaudin pueden unificarse de forma que engloben también a las tres familias de modelos de Gaudin (racional, trigonométrico e hiperbólico) y no sólo al racional. Los tres pueden ser generalizados incluyendo de un término lineal en los invariantes cuánticos. Esta unificación también es válida para sistemas bosónicos. Aquí seguiremos únicamente la discusión para el caso fermiónico.

Si se consideran los operadores hermíticos más generales que conserven el número de partículas y que sean cuadráticos tenemos:

$$R_l = K_l^0 + 2G \sum_{l'(\neq l)} \left[ \frac{X_{ll'}}{2} (K_l^+ K_{l'}^- + K_l^- K_{l'}^+) + Y_{ll'} K_l^0 K_{l'}^0 \right]. \quad (10.27)$$

Estos operadores son una sencilla generalización de los operadores de la expresión (10.22). Las matrices  $X$  e  $Y$  deben satisfacer ciertas relaciones para que los operadores  $R$  conmuten entre si. Estas condiciones coinciden con las encontradas por Gaudin [Gau76]. Las tres familias se pueden escribir en una forma compacta de la forma siguiente:

$$X_{ij} = \frac{\gamma}{\sin[\gamma(\eta_i - \eta_j)]}, \quad Y_{ij} = \gamma \cot[\gamma(\eta_i - \eta_j)], \quad (10.28)$$

donde  $\gamma \rightarrow 0$  corresponde al modelo racional,  $\gamma = 1$  es el modelo trigonométrico y  $\gamma = i$  al modelo hiperbólico. Los tres límites son completamente equivalentes a los que presentó Gaudin.

Lo siguiente corresponde a encontrar los autoestados para estos modelos:

$$R_l|\Psi\rangle = r_l|\Psi\rangle. \quad (10.29)$$

Esto es posible realizarlo usando un ansatz similar al usado por Richardson para resolver el modelo de apareamiento:

$$|\Psi\rangle = \prod_{\alpha=1}^{n_0} B_{\alpha}^{\dagger} |v\rangle, \quad B_{\alpha}^{\dagger} = \sum_{i=1}^{\Omega} u_i(e_{\alpha}) K_i^+ \quad (10.30)$$

El estado  $|\Psi\rangle$  es un producto de operadores de pares colectivos  $B_{\alpha}^{\dagger}$ . Escribamos las soluciones correspondientes a cada una de las familias:

I) El modelo racional:

$$u_i(e_{\alpha}) = \frac{1}{2\eta_i - e_{\alpha}}, \quad (10.31)$$

$$1 - 4G \sum_j \frac{d_j}{2\eta_j - e_{\alpha}} + 4G \sum_{\beta(\neq\alpha)} \frac{1}{e_{\alpha} - e_{\beta}} = 0, \quad (10.32)$$

$$r_i = d_i \left[ 1 + 2G \sum_{j(\neq i)} \frac{d_j}{\eta_i - \eta_j} + 8G \sum_{\alpha} \frac{1}{2\eta_i - e_{\alpha}} \right]. \quad (10.33)$$

II-III) Modelos trigonométrico e hiperbólico

Los modelos trigonométricos e hiperbólico pueden unificarse bajo una misma notación. Usando las expresiones  $sn$  para  $\sin$  en el caso trigonométrico y  $\sinh$  para el caso hiperbólico. Lo mismo con la expresión  $ct$ .

$$u_i(e_{\alpha}) = \frac{1}{sn(e_{\alpha} - \eta_i)}, \quad (10.34)$$

$$1 + 2G \sum_j d_j ct(e_{\alpha} - \eta_j) - 2G \sum_{\beta(\neq\alpha)} ct(e_{\beta} - e_{\alpha}) = 0, \quad (10.35)$$

$$r_i = d_i \left\{ 1 + 2G \left[ \sum_{j(\neq i)} d_j ct(\eta_i - \eta_j) - \sum_{\alpha} ct(e_{\alpha} - 2\eta_i) \right] \right\} \quad (10.36)$$

En todas las ecuaciones anteriores, la cantidad  $d_l$  está dada por:

$$d_l = \frac{v_l}{2} - \frac{D_l}{4}. \quad (10.37)$$

Dado un conjunto de parámetros y fijado un valor para la constante de apareamiento  $G$ , las energías  $e_{\alpha}$  son obtenidas resolviendo el conjunto acoplado de  $n_0$  ecuaciones no lineales (10.32) si se desea resolver el caso racional y las ecuaciones (10.35) para los casos trigonométricos e hiperbólicos.

En el límite  $G \rightarrow 0$ , las ecuaciones (10.32) y (10.35) tienen por solución  $e_{\alpha} \rightarrow 2\eta_i$ . En dicho límite, las amplitudes  $u_i(e_{\alpha})$  se vuelven diagonales y los estados  $|\Psi\rangle$  se vuelven un producto de pares descorrelacionados cuando sobre un estado descorrelacionado. Para sistemas fermiónicos las soluciones  $e_{\alpha}$  pueden ser complejas, y si esto ocurre aparecen por pares complejo-conjugados. En este último caso las ecuaciones (10.32) y (10.35) pueden presentar singularidades cuando para algún valor crítico de la constante  $G$  (digamos  $G_c$ ) dos o más  $e_{\alpha}$  adquieren el mismo valor. Estas singularidades, sin embargo, no afectan a los valores de la energía, la cual no presente ninguna peculiaridad en torno a los puntos singulares. Estos afectan únicamente a la solución de las ecuaciones (10.32) y (10.35) las cuales pueden hacerse complejas de resolver numéricamente cuando el valor de  $G$  se acerca al crítico  $G_c$ .

Los autovalores de los operadores  $R$ , dado por las ecuaciones (10.33) y (10.36), son siempre reales pues las energías de pares son siempre reales o aparecen en pares complejo conjugadas. Cada solución del conjunto no lineal de ecuaciones genera un autoestado común a todos los operadores  $R_i$ , y en consecuencia para cualquier Hamiltoniano que está escrito como combinación lineal de ellos. Las energías del correspondiente Hamiltoniano son la misma combinación lineal de los autovalores  $r_i$ .

### 10.3 Elección del Hamiltoniano Generalizado de apareamiento

Como sabemos de la sección anterior existen tres familias de modelos basados en la interacción de apareamiento que poseen solución exacta. A continuación vamos a encontrar la forma que posee dicho hamiltoniano que engloba a las tres familias. Este hamiltoniano se debe escribir (ver la sección anterior) como combinación lineal de los operadores  $R_l$ , es decir

$$H = 2 \sum_l \epsilon_l R_l. \quad (10.38)$$

Recordemos que los parámetros  $\epsilon_l$  son constantes cualesquiera. Desarrollemos la fórmula anterior:

$$H = \underbrace{2 \sum_l \epsilon_l K_l^0}_{H_1} + \underbrace{4G \sum_{l,l'(\neq l)} \epsilon_l \left\{ \frac{X_{ll'}}{2} (K_l^\dagger K_{l'}^- + K_l^- K_{l'}^\dagger) + Y_{ll'} K_l^0 K_{l'}^0 \right\}}_{H_2}. \quad (10.39)$$

Empezamos calculando  $H_1$ :

$$H_1 = 2 \sum_l \epsilon_l K_l^0 = 2 \sum_l \epsilon_l \left[ \frac{1}{2} n_l - \frac{1}{4} D_l \right] = \sum_l \epsilon_l n_l - \frac{1}{2} \epsilon_l D_l \quad (10.40)$$

Para  $H_2$  tenemos:

$$H_2 = \underbrace{2G \sum_{l,l'(\neq l)} \epsilon_l X_{ll'} (K_l^\dagger K_{l'}^- + K_l^- K_{l'}^\dagger)}_{H_{21}} + \underbrace{4G \sum_{l,l'(\neq l)} \epsilon_l Y_{ll'} K_l^0 K_{l'}^0}_{H_{22}}. \quad (10.41)$$

Calculando por separado ambas contribuciones:

$$H_{21} = \frac{G}{2} \sum_{l,l'(\neq l)} \epsilon_l X_{ll'} (A_l^\dagger A_{l'} + A_l A_{l'}^\dagger) = \frac{G}{2} \sum_{l,l'(\neq l)} \epsilon_l X_{ll'} (A_l^\dagger A_{l'} + A_{l'}^\dagger A_l). \quad (10.42)$$

Aplicando a esta última expresión la antisimetría de las matrices  $X, Y$  encontramos:

$$H_{21} = \frac{G}{2} \sum_{l,l'(\neq l)} (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) X_{ll'} A_l^\dagger A_{l'}. \quad (10.43)$$

Para  $H_{22}$ :

$$\begin{aligned} H_{22} &= 4G \sum_{l,l'(\neq l)} \epsilon_l Y_{ll'} \left( \frac{1}{2} n_l - \frac{1}{4} D_l \right) \left( \frac{1}{2} n_{l'} - \frac{1}{4} D_{l'} \right) = \\ &= 4G \sum_{l,l'(\neq l)} \epsilon_l Y_{ll'} \left( \frac{1}{4} n_l n_{l'} - \frac{1}{8} n_l D_{l'} - \frac{1}{8} n_{l'} D_l + \frac{1}{16} D_l D_{l'} \right) \end{aligned} \quad (10.44)$$

Finalmente reordenando los términos y usando la antisimetría de la matriz  $Y_{ll'}$  se llega a:

$$\begin{aligned} H_{22} &= -\frac{G}{2} \sum_{l,l'(\neq l)} (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) Y_{ll'} n_l D_{l'} + \frac{G}{2} \sum_{l,l'(\neq l)} (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) Y_{ll'} n_l n_{l'} + \\ &= \frac{G}{8} \sum_{l,l'(\neq l)} (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) Y_{ll'} D_l D_{l'} \end{aligned} \quad (10.45)$$

Juntando todos estos resultados parciales encontramos la expresión para el Hamiltoniano total:

$$H = \sum_l \tilde{\epsilon}_l n_l + \frac{G}{2} \sum_{l'l'(\neq l)} (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) X_{ll'} A_l^\dagger A_{l'} + \frac{G}{2} \sum_{l'l'(\neq l)} (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) Y_{ll'} n_l n_{l'} + \frac{G}{8} \sum_{l'l'(\neq l)} (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) Y_{ll'} D_l D_{l'} - \frac{1}{2} \sum_l \epsilon_l D_l \quad (10.46)$$

con

$$\tilde{\epsilon}_l = \epsilon_l - \frac{G}{2} \sum_{l'l'(\neq l)} (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) Y_{ll'} D_{l'} \quad (10.47)$$

El Hamiltoniano (10.46) se puede escribir de una forma más compacta y útil:

$$H = \sum_l \tilde{\epsilon}_l n_l + \sum_{l'l'(\neq l)} V_{ll'}^1 A_l^\dagger A_{l'} + \sum_{l'l'(\neq l)} V_{ll'}^2 n_l n_{l'} + cte \quad (10.48)$$

Siendo  $V_{ll'}^1, V_{ll'}^2$  los "potenciales" de interacción dados por:

$$V_{ll'}^1 = \frac{G}{2} (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) X_{ll'}, \quad V_{ll'}^2 = \frac{G}{2} (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) Y_{ll'} \quad (10.49)$$

Siendo la constante:

$$cte = \frac{G}{8} \sum_{l'l'(\neq l)} (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) Y_{ll'} D_l D_{l'} - \frac{1}{2} \sum_l \epsilon_l D_l \quad (10.50)$$

A partir de ahora será con el Hamiltoniano (10.48) nuestro punto de partida para extender los resultados hacia los modelos generalizados de apareamiento.

El hamiltoniano (10.48) posee solución exacta cuando los potenciales  $V^1$  y  $V^2$  se escriban de la forma:

$$V_{ll'}^1 = \frac{G}{2} \frac{\gamma (\epsilon_l - \epsilon_{l'})}{\sin[\gamma(\eta_l - \eta_{l'})]} \quad V_{ll'}^2 = \frac{G}{2} \gamma (\epsilon_l - \epsilon_{l'}) \cot[\gamma(\eta_l - \eta_{l'})] \quad (10.51)$$

En función del parámetro  $\gamma$  se tendrán las distintas familias,  $\gamma \rightarrow 0$  para la racional,  $\gamma = 1$  para la trigonométrica y  $\gamma = i$  para la hiperbólica.

## 10.4 La teoría BCS en el modelo generalizado de apareamiento

Una vez definido el hamiltoniano generalizado debemos empezar a considerar las sucesivas aproximaciones para tratar de resolverlo.



Este es el turno de estudiar la teoría de campo medio BCS. Comencemos por expresar la energía y posteriormente deduciremos las ecuaciones variacionales.

El Ansatz BCS está dado por (4.2)

$$|BCS\rangle_p = \prod_k (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \quad (10.52)$$

Al igual que en el caso del Hamiltoniano de apareamiento generalizado debemos usar un Hamiltoniano modificado usando la ligadura del número de partículas, para que en promedio el número de partículas sea el requerido. El hamiltoniano modificado es:

$$H' = H - \mu \hat{N} \quad (10.53)$$

La expresión para la energía es (los detalles de estos cálculos se muestran en el apéndice (H))

$$E' = 2 \sum_i (\hat{\epsilon}_i - \mu) v_i^2 + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 u_i v_i u_j v_j + 4 \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 v_i^2 v_j^2 \quad (10.54)$$

Para encontrar las amplitudes debemos resolver las ecuaciones variacionales obtenidas al usar el principio variacional de Ritz:

$$\delta_{v_k} E' = 0. \quad (10.55)$$

Dicha variación produce el conjunto de ecuaciones:

$$2 (\tilde{\epsilon}_k - \mu) u_k v_k + \Delta_k (v_k^2 - u_k^2) = 0 \quad (10.56)$$

Como vemos corresponde a la misma estructura de las ecuaciones BCS correspondientes al hamiltoniano de apareamiento reducido. De esta forma la forma de resolverlas transcurre en paralelo con aquella forma (ver en apéndice H para más detalles)

## 10.5 La teoría proyectada en el modelo generalizado de apareamiento

Veamos ahora la forma que toma la teoría proyectada con el Hamiltoniano generalizado

$$H = \sum_i \hat{\epsilon}_i n_i + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 c_{i+}^\dagger c_{i-}^\dagger c_{j-} c_{j+} + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 n_i n_j \quad (10.57)$$

Mostremos primero la energía proyectada  $E_p$  usando el Ansatz correspondiente a la proyección BCS  $|BCS\rangle_N$

$$E_P = \frac{\langle BCS | H | \rangle_N}{\langle BCS | BCS \rangle_N} \quad (10.58)$$

La evaluación de esta energía da como resultado (ver el apéndice I)

$$E_P = 2 \sum_i \hat{\epsilon}_i v_i^2 \frac{R_1^i}{R_0^0} + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 u_i v_i u_j v_j \frac{R_1^{ij}}{R_0^0} + 4 \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 v_i^2 v_j^2 \frac{R_2^{ij}}{R_0^0} \quad (10.59)$$

Demos ahora las ecuaciones variacionales deducidas a partir del principio variacional de Ritz:

$$(\tilde{\epsilon}_k + \Gamma_k + \Lambda_k) u_k v_k + \Delta_k (u_k^2 + v_k^2) = 0 \quad (10.60)$$

Donde las campos  $\tilde{\epsilon}_k$ ,  $\Gamma_k$ ,  $\Lambda_k$  y  $\Delta_k$  tienen por expresión:

$$\tilde{\epsilon}_k = \hat{\epsilon}_k \frac{R_1^k}{R_0^0} \quad (10.61)$$

$$\Gamma_k = 4 \sum_{i,k(i \neq k)} V_{ik}^2 v_i^2 \frac{R_2^{ik}}{R_0^0} \quad (10.62)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_k = & \sum_{i(i \neq k)} \hat{\epsilon}_i v_i^2 \left( \frac{R_2^{ik} - R_1^{ik}}{R_0^0} - \frac{R_1^i R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) + \\ & \sum_{i,j(i \neq j, \neq k)} \frac{V_{ij}^1}{2} u_i v_i u_j v_j \left( \frac{R_2^{ijk} - R_1^{ijk}}{R_0^0} - \frac{R_1^{ij} R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) + \\ & 2 \sum_{i,j(i \neq j \neq k)} V_{ij}^2 v_i^2 v_j^2 \left( \frac{R_3^{ijk} - R_2^{ijk}}{R_0^0} - \frac{R_2^{ij} R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) \end{aligned} \quad (10.63)$$

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum_{i(i \neq k)} V_{ik}^1 u_i v_i \frac{R_1^{ik}}{R_0^0} \quad (10.64)$$

La forma de resolverlas está explicada en el apéndice I.

## 10.6 El método de la coordenada generadora en el modelo de apareamiento generalizado

Veamos ahora las expresiones correspondientes al método de la coordenada generadora aplicadas al hamiltoniano de apareamiento generalizado. Para ello es necesario encontrar el solape de la norma y del Hamiltoniano, (7.5) y (7.6) respectivamente.

Para el solape de la norma se encuentra:

$$\mathcal{N}_{\xi\xi'} = R_0^0(\xi, \xi') \quad (10.65)$$

y para el solape del Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\xi\xi'} = 2 \sum_i \hat{\epsilon}_i v_i(\xi) v_i(\xi') R_1^i(\xi, \xi') + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 u_i(\xi) v_i(\xi') u_j(\xi) v_j(\xi') R_1^{ij}(\xi, \xi') + \\ 4 \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 v_i(\xi) v_i(\xi') v_j(\xi) v_j(\xi') R_2^{ij}(\xi, \xi') \end{aligned} \quad (10.66)$$

COMENTARIOS



## APLICACIONES DEL MCG EN LOS MODELOS DE RICHARDSON-GAUDIN

### 11.1 Introducción

Como vimos en el capítulo anterior es posible construir un conjunto de hamiltonianos basados en la interacción de apareamiento los cuales poseen solución exacta.

Muy recientemente este conjunto de modelos viene siendo utilizado para describir diversos fenómenos. Como ejemplos de estas aplicaciones pueden servir la transición de fase cuántica en el modelo de bosones interactuantes (*interactin boson model*, IBM) [ADGR03], aplicaciones a sistemas atómicos y moleculares bosónicos [DDEP04], sistemas bosónicos atrapados [DDP04] y aplicaciones a estructura nuclear [DGI<sup>+</sup>06].

Nuestra motivación en esta última parte de la tesis no es la de aplicar estos modelos a algún sistema físico en concreto, sino la de comprobar la utilidad del método de la coordenada generadora (MCG) en dichos modelos. Para este fin usaremos las tres familias de modelos generalizados dados en el capítulo anterior (racional, trigonométrica e hiperbólica) usando varias prescripciones en la elección de los parámetros libres  $\eta_k$ , las cuales serán comparadas con sus respectivas soluciones exactas allí donde sea posible. Para completar nuestro estudio también realizaremos un análisis de un caso para el que no se tiene la solución exacta, cuando las matrices de interacción  $V_{ij}^1, V_{ij}^2$  son aleatorias.

Asimismo para generalizar la discusión y la variedad de resultados posibles los cálculos realizados con el MCG serán comparados con las aproximaciones de campo medio (teoría BCS) y proyección al número de partículas (teoría PBCS).

### 11.2 El modelo

A lo largo de este capítulo todos los cálculos los realizamos usando el mismo modelo (usando los mismos estados base) que hemos utilizado en los capítulos precedentes sobre el hamiltoniano de apareamiento reducido. Es decir, el modelo consta de niveles equiespaciados ( $\epsilon_k = k d$ ) doblemente degenerados  $|k\pm\rangle$ . Escogemos el número de niveles igual al número de partículas. La constante de interacción  $G$  se ha mantenido como  $G = \lambda d$ , siendo  $d$  el espaciado entre niveles dado por

$d = 2 \sinh(1/\lambda)\tilde{\Delta}/N$ . En este caso hemos elegido la constante sin dimensiones  $\lambda$  como  $\lambda = 0.5$  a diferencia del valor  $\lambda = 0.224$  usado en los cálculos con el hamiltoniano de apareamiento reducido, y mantenemos para  $\tilde{\Delta}$  el valor que usamos anteriormente  $\tilde{\Delta} = 0.38meV$ .

## 11.3 Hamiltoniano con solución exacta

Esta primera parte se dedica a los resultados obtenidos usando los hamiltonianos para los que existe solución exacta. Como obtuvimos en el capítulo precedente, la expresión correspondiente a dicho conjunto de hamiltonianos es la siguiente:

$$H = \sum_i \hat{\epsilon}_i n_i + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 c_{i+}^\dagger c_{i-}^\dagger c_{j-} c_{j+} + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 n_i n_j. \quad (11.1)$$

Como sabemos, en función de los valores que tomen las matrices de interacción  $V_{ij}^1$  y  $V_{ij}^2$  el hamiltoniano podrá tener o no solución exacta. El conjunto de parámetros  $\hat{\epsilon}_i$ ,  $V_{ij}^1$ ,  $V_{ij}^2$  es el responsable de clasificar el hamiltoniano dentro de los exactamente solubles. Como se dijo en el capítulo anterior el conjunto de hamiltonianos que pertenece a los que poseen solución exacta adquieren las siguientes expresiones:

$$\hat{\epsilon}_i = \epsilon_k - G \sum_{l(i \neq i)} \gamma (\epsilon_i - \epsilon_l) \cot \gamma (\eta_i - \eta_l), \quad (11.2)$$

$$V_{ij}^1 = \frac{G}{2} \frac{\gamma (\epsilon_i - \epsilon_j)}{\sin \gamma (\eta_i - \eta_j)}, \quad (11.3)$$

$$V_{ij}^2 = \frac{G}{2} \gamma (\epsilon_i - \epsilon_j) \cot \gamma (\eta_i - \eta_j). \quad (11.4)$$

El parámetro  $\gamma$  define los tres modelos o familias posibles en las que se dividen los hamiltonianos con solución exacta. Estas son como ya se discutió el modelo racional ( $\gamma = 0$ ), el trigonométrico ( $\gamma = 1$ ) y el hiperbólico ( $\gamma = -i$ ).

En lo que resta de esta sección dedicada a los hamiltonianos con solución exacta plantearemos por separado cada una de las familias. Dentro de cada una de ellas hemos elegido tres prescripciones distintas para el conjunto de parámetros  $\eta_k$ .

Calcularemos la energía de condensación (ver definición en el capítulo 9.3.1) para un sistema con un número par de electrones que será comparada con el resto de aproximaciones y con la solución exacta. Hemos de hacer notar que definimos aquí la energía de condensación de la misma forma que se hizo para el caso del hamiltoniano reducido, es decir, como la diferencia entre la energía total ( $\langle H \rangle$ ) y la energía no correlacionada correspondiente al estado Hartree-Fock ( $\langle HF|H|HF \rangle$ ). Adoptamos esta definición con el ánimo de ser consistentes con los resultados obtenidos en la primera parte de la tesis.

Debemos hacer notar que sólo presentamos resultados numéricos de la solución exacta para la familia racional (en sus tres parametrizaciones). Para las familias trigonométrica e hiperbólica

no conocemos la forma matemática para resolver el conjunto de ecuaciones (10.35). El motivo fundamental de la dificultad reside en evitar el problema de las singularidades que presentan estas ecuaciones. Es decir, encontrar un método general basado en un cambio de coordenadas como el que hemos usado (encontrado por Richardson [Ric66]) pero aplicado a las ecuaciones (10.35) correspondientes a las familias trigonométrica e hiperbólica.

### 11.3.1. Las parametrizaciones $\eta_k$

Pasemos a la discusión de las distintas elecciones de los parámetros  $\eta_k$  que hemos utilizado en los cálculos.

**Primera prescripción:**  $\eta_k = \epsilon_k$

Es la elección más sencilla posible. En el caso de la familia racional proporciona elementos de matriz  $V_{ij}^1$  y  $V_{ij}^2$  constantes. Esta elección conduce al hamiltoniano de apareamiento reducido (salvo una constante). De modo que los resultados obtenidos con esta parametrización deben tener a priori semejanza con los que se obtuvieron para el hamiltoniano de apareamiento reducido.

**Segunda prescripción:**  $\eta_k = \epsilon_k / \sqrt{k}$

Como consecuencia de esta elección obtenemos para todas las familias elementos de matriz  $V_{ij}^1$  y  $V_{ij}^2$  dependientes del estado. Desde este punto de vista nos encontramos con hamiltonianos que no guardan parecido con el hamiltoniano de apareamiento reducido y en consecuencia los resultados obtenidos en principio distarán de los obtenidos con aquel.

En términos generales con esta elección la intensidad de la interacción es mayor en niveles próximos.

**Tercera prescripción:**  $\eta_k = \epsilon_k / \sqrt{N + 1 - k}$

Esta prescripción es una leve modificación de la anterior. La idea es desplazar la intensidad de la interacción a niveles más alejados que lo que resulta en la prescripción anterior.

### 11.3.2. Elección de la coordenada generadora

En principio nuestro método basado en utilizar como estado del sistema el *Ansatz* (8.4) es lo suficientemente general como para aplicarlo directamente a cualquier elección de los parámetros  $\eta_k$ .

Pasemos ahora a fijar la coordenada generadora que utilizaremos en los cálculos MCG en esta parte de la tesis. Debido a la complicación que presentan los hamiltonianos no desarrollamos un estudio exhaustivo de las distintas posibilidades como hicimos para el caso del hamiltoniano reducido. A partir de la experiencia ganada en aquellos cálculos nos restringiremos al uso de una única coordenada, la que ofrezca una relativa sencillez de cálculo y que por otra parte haya ofrecido buenos resultados previos. Esta coordenada es sin duda, la coordenada del parámetro de orden *gap*  $\Delta$ . Sin embargo, a la hora de adoptar esta coordenada hay que tener en cuenta que ahora tratamos con hamiltonianos para los cuales el parámetro  $\Delta$  está definido como función de cada estado  $k$ ,  $\Delta_k$ , ver la expresión (H.21) del apéndice H. Para evitar esta dependencia presentaremos los resultados en función de la constante de interacción  $G$  (realmente es la auténtica coordenada generadora)

como hicimos en el capítulo 9. Asimismo la forma forma de realizar los cálculos es idéntica a la explicada en el capítulo 9.

### 11.3.3. Detalles de los cálculos con el MCG

La metodología de implementar el MCG para los hamiltonianos generalizados que tratamos en éste capítulo no dista mucho de la que fue presentada para tratar el hamiltoniano de apareamiento reducido, y son válidos igualmente los pasos que fueron realizados allí.

Para no hacer demasiado largo nuestro análisis no mostraremos para estos modelos el comportamiento del MCG con respecto a la convergencia y al número de puntos necesarios para obtener los resultados presentados. Diremos a modo de síntesis que están de acuerdo con las conclusiones que fueron obtenidas respecto de estas cuestiones en el capítulo anterior.

### 11.3.4. Modelo racional ( $\gamma = 0$ )

Comencemos por la familia más sencilla, la que corresponde al modelo racional ( $\gamma = 0$ ). En este caso los parámetros de la interacción vienen dados por:

$$\hat{\epsilon}_i = \epsilon_i - G \sum_{l(\neq i)} \frac{\epsilon_i - \epsilon_l}{\eta_i - \eta_l}, \quad V_{ij}^1 = \frac{G}{2} \frac{\epsilon_i - \epsilon_j}{\eta_i - \eta_j}, \quad V_{ij}^1 = V_{ij}^2. \quad (11.5)$$

Aún tenemos que fijar el conjunto de parámetros  $\eta_k$  para fijar los elementos de matriz de la interacción. Estudiemos cada una de las parametrizaciones por separado.

#### Parametrización 1: $\eta_k = \epsilon_k$

Esta elección es la más elemental de todas y provee elementos de matriz constantes. En este caso el hamiltoniano obtenido es salvo una constante el hamiltoniano BCS reducido.

$$\hat{\epsilon}_k = \epsilon_k - G N(N - 1), \quad V_{ij}^1 = \frac{G}{2}, \quad V_{ij}^2 = \frac{G}{2}. \quad (11.6)$$

#### Energías de condensación

Comencemos por mostrar los resultados para las energías de condensación. En la fig. 11.1 se muestra la energía de condensación para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV, MCGVAP y EXACTA.

Como era de esperar el aspecto que presenta esta figura es similar al que se encontró para el hamiltoniano de apareamiento reducido, fig. 9.11 (panel superior).

De la fig. 11.1 se desprende que la aproximación de campo medio BCS predice una transición abrupta para  $N = 20$  electrones. Dentro de la fase superconductora ( $N > 20$ ) la ganancia de energía es prácticamente lineal con respecto al número de partículas, mostrando así el sistema un carácter puramente extensivo.

Cuando se restaura el número de partículas con el método proyectado PBCS encontramos un comportamiento análogo al que se encuentra para el caso del apareamiento reducido. Por un lado, aparte de obtener energías siempre menores que para el caso BCS se predice la existencia de



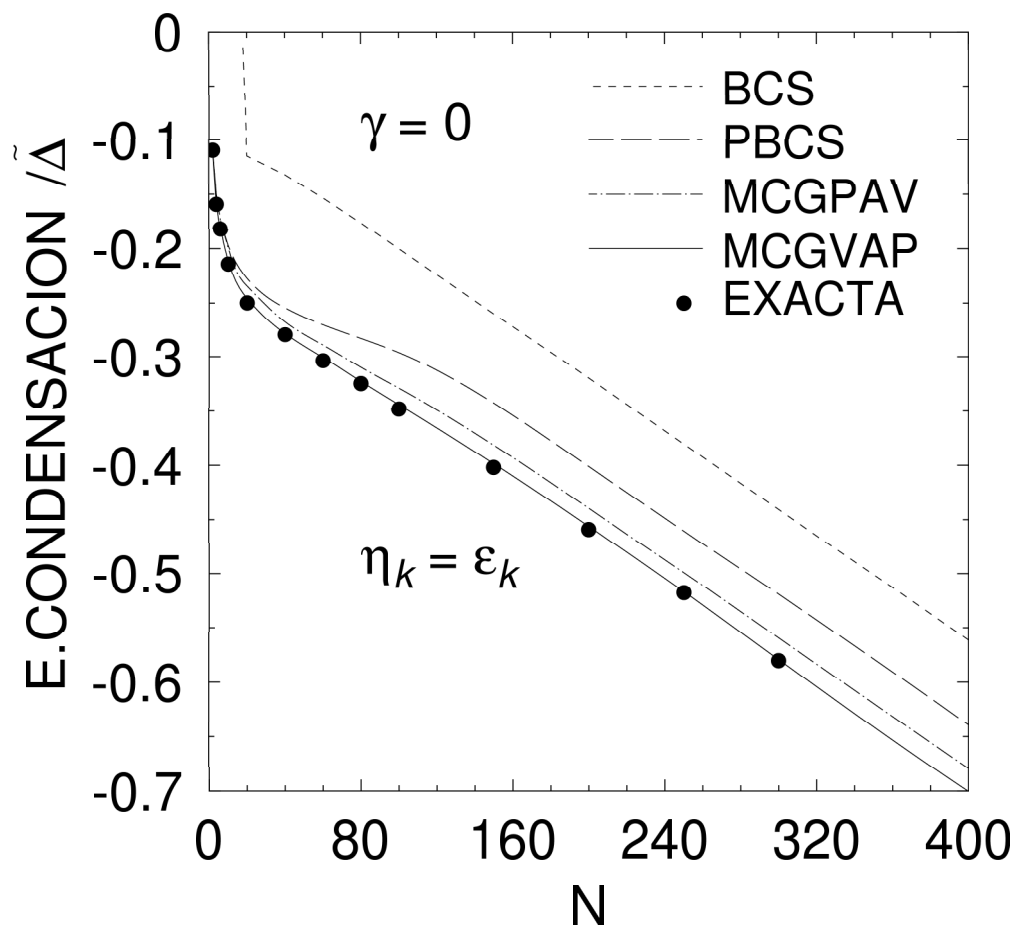


Figura 11.1: Energías de condensación de un sistema con un número par de electrones en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV, MCGVAP y la solución exacta.

correlaciones para cualquier número de electrones. Sin embargo su evolución con respecto al tamaño del sistema, es decir, con el número de electrones no es uniforme. En efecto, hasta  $N = 20$  el sistema gana energía muy rápidamente, en la región intermedia ( $20 \leq N \leq 80$ ) la proyección predice una transición suave en la cual la ganancia de energía disminuye considerablemente hasta que finalmente el sistema entra en el régimen puramente lineal como en el caso BCS. Notemos, por otro lado, que esta transición entre ambas regiones no ocurre de forma abrupta como se obtuvo para el hamiltoniano reducido. Sin embargo, de nuevo encontramos que tal transición es artificial y no se observa en la solución exacta.

La solución exacta nos provee con un comportamiento igual al encontrado con la proyección para la región de pocos electrones ( $N \leq 20$ ), por tanto el método proyectado predice este régimen muy bien, y no sólo cualitativamente sino cuantitativamente con gran precisión. A partir de  $N = 20$  la solución exacta describe una transición especialmente suave cuyo aspecto en nada recuerda al de la proyección. Demostrando así de nuevo lo extraordinariamente infructuoso del tratamiento de la correlaciones por parte del método proyectado. Para el régimen de muchas partículas la solución exacta muestra también el comportamiento lineal al igual que las curvas BCS y PBCS, aunque numéricamente estas quedan lejos de la solución exacta.

Pasemos ahora a analizar las curvas correspondientes a los cálculos con el MCG. Como se puede observar, ambas curvas MCGPAV y MCGVAP reducen la energía considerablemente respecto de la proyección. De nuevo, encontramos un perfecto acuerdo entre ambas aproximaciones y la solución exacta en el régimen de pocas partículas ( $N \leq 20$ ). En la región de transición ambas teorías predicen una evolución suave de la energía, exactamente igual que en la solución exacta. Sin embargo el método MCGPAV subestima las correlaciones a partir de ese número de partículas quedando un poco lejos de la solución exacta. Sin embargo, los cálculos realizados con la versión MCGVAP son capaces de reproducir con gran precisión los valores de la solución exacta. El grado de precisión alcanzado está en perfecto acuerdo con el que se obtuvo en el caso del hamiltoniano reducido.

### Funciones de onda colectivas

Analizemos ahora el comportamiento de las funciones de onda colectivas en el MCG.

En la fig. 11.2 se presentan las funciones colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  (líneas discontinuas) para el estado fundamental del sistema para ambas aproximaciones MCGPAV (línea discontinua fina) y MCGVAP (línea discontinua gruesa).

Como casos representativos en cada región se han elegido los siguientes número de partículas:  $N = 20$  para la región de pocas partículas,  $N = 40$  y  $N = 80$  para la región de transición y  $N = 100, 200, 400$  para representar el caso de muchas partículas. También se han representado las curvas de energía proyectada (líneas continuas) en ambas aproximaciones MCGPAV (línea continua fina) y MCGVAP (línea continua gruesa). La escala de la energía se ha elegido de tal forma que los mínimos de las superficies de energía estén en cero. Todo este esquema es válido para todas las figuras restantes correspondientes a las funciones de onda colectivas.

Notemos que hemos representado las funciones de onda colectivas en función de la coordenada  $G - G_c$ . Volvamos a indicar el significado de la constante  $G_c$ . Básicamente esta constante expresa que la solución superconductora aparece a partir de un cierto valor (crítico) de la constante de interacción  $G$ . Es decir, que no existe solución superconductora por debajo de  $G_c$ . Hay que hacer notar de nuevo, que en el caso MCGVAP el valor de  $G_c$  es muy pequeño (próximo a cero) y no depende apenas con el número de partículas, mientras que para la aproximación MCGPAV no se comporta en modo alguno de tal forma. Esto será importante para comprender la posición relativa de los pozos de energía en las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

En la tabla 11.1 mostramos los valores iniciales ( $G_i$ ) y finales ( $G_f$ ) para la coordenada generadora  $G$ , de modo que el valor inicial ( $G_i$ ) coincide con  $G_c$  para cada aproximación. Como observamos en la tabla 11.1, obtenemos rangos para la diferencia  $G - G_c$  que en la aproximación MCGPAV solapan con los de MCGVAP. Esto no ocurría para el caso del hamiltoniano reducido (ver tabla 9.2).<sup>1</sup> En virtud de esta diferencia la situación relativa de cada pozo de energía en la fig. 11.2 cambia con respecto a las que se mostraban en la fig. 9.13. Ahora los pozos correspondientes a la aproximación MCGVAP están por debajo de los correspondientes a la aproximación MCGPAV como efecto de la superposición en los rangos de  $G - G_c$ .

Empecemos el análisis de las funciones de onda colectivas para  $N = 20$ . En este caso nos

---

<sup>1</sup>la tabla 9.2 no contiene los resultados para la constante  $(G_i)_{VAP}$  pues se obtienen valores muy cercanos a cero.

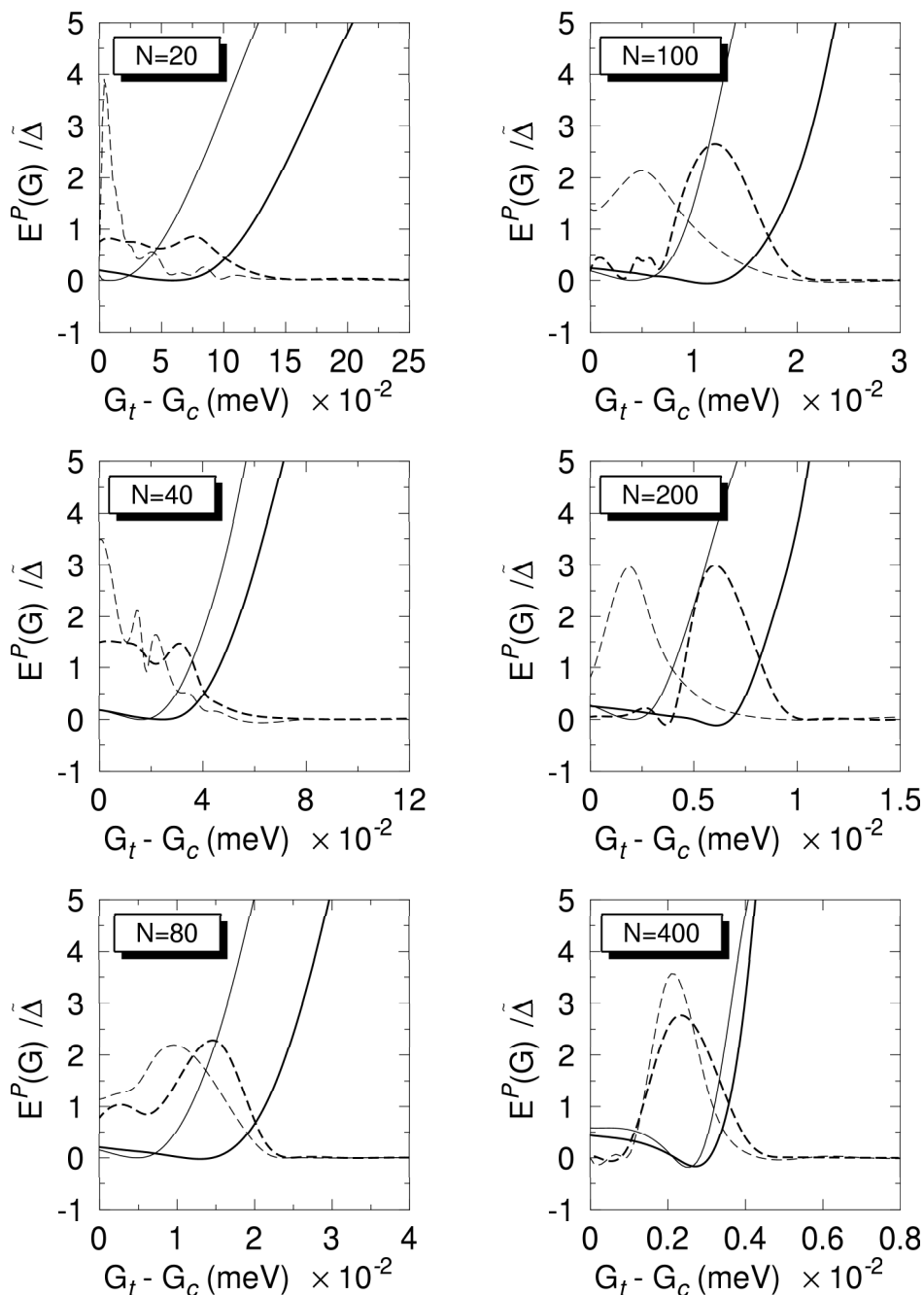


Figura 11.2: Funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  (en la figura  $|g(G)|^2$ ) (líneas discontinúas) y energías proyectadas (líneas continuas) como función de la constante de interacción  $G - G_c$  (ver significado de  $G_c$  en el texto) del estado fundamental de un sistema con un número de partículas par para las aproximaciones MCGPAV (líneas finas) y MCGVAP (líneas gruesas). La escala del eje de las ordenadas hace referencia a las unidades de energía  $E_P(G)/\tilde{\Delta}$ , los mínimos de las curvas de energía se han desplazado al origen de energías. El área que cubre las funciones colectivas es igual para las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP para cada número de partículas separadamente.

encontramos con un potencial aproximadamente parabólico para el caso MCGPAV, como vemos presenta un mínimo para valores de  $G - G_c$  cercanos a la unidad. Es precisamente aquí como

$N$	20	40	80	100	200	400
$(G_i)_{PAV}$	0.065	0.020	0.013	0.010	0.005	0.001
$(G_f)_{PAV}$	0.500	0.150	0.100	0.070	0.023	0.020
$(G_i)_{VAP}$	0.010	0.010	0.004	0.002	0.001	0.0008
$(G_f)_{VAP}$	0.700	0.200	0.045	0.040	0.016	0.0090

Tabla 11.1: Valores iniciales y finales para la coordenada generadora (medidas en meV) usadas en los cálculos. Los subíndices PAV (VAP) corresponden a las aproximaciones MCGPAV (MCGVAP).

observamos donde la función colectiva presenta la mayor probabilidad de tener dicho rango de valores  $G$ . En el caso MCGVAP el comportamiento es bien distinto. Ahora encontramos una región considerablemente más grande, en la cual contribuyen hasta valores de  $G - G_c \approx 8$ . El potencial presenta aquí un aspecto plano. Observando las funciones colectivas vemos cómo en toda esta zona la probabilidad es aproximadamente constante expresando así que esta región está dominada por fuertes fluctuaciones.

Para la región de transición  $N = 40, 80$  observamos una situación semejante. La predicción MCGPAV concentra los valores de probabilidad más grandes hacia valores pequeños de  $G - G_c$  mientras que el método MCGVAP extiende la probabilidad hacia valores mayores de  $G - G_c$ . Ratificando de nuevo la presencia de fluctuaciones cuánticas. Para  $N = 80$  la situación cambia ligeramente, ahora las probabilidades no están tan repartidas sino que empiezan a centralizarse hacia valores concretos de  $G - G_c$ , en cualquier caso estos valores son siempre mayores que para el MCGPAV.

Para  $N = 100, 200$  las distribuciones de probabilidad quedan perfectamente centradas en valores concretos de la constante  $G - G_c$ , mucho más evidente para  $N = 200$ , de igual forma estos valores más probables están desplazados a valores mayores en el caso MCGVAP. Esto demuestra que el sistema se encuentra en una situación claramente superconductora. Notemos que para el caso  $N = 200$  aparentemente no se ha alcanzado una situación en el régimen de muchas partículas debido a que las pozos de potencial aparecen separados. Sin embargo si se tiene presente la tabla 11.1 y se efectúa el desplazamiento adecuado de los pozos de potencial se obtendrá que ambos coinciden en sus mínimos. Confirmando que se ha alcanzado el régimen de muchas partículas.

Finalmente para  $N = 400$  ambas predicciones coinciden en representar las distribuciones de probabilidad de la misma forma, desarrollando un máximo en un valor de  $G - G_c \approx 0.25$ .

### Parametrización 2: $\eta_k = \epsilon_k / \sqrt{k}$

En este caso obtenemos elementos de matriz dependientes de los estados:

$$\hat{\epsilon}_k = \epsilon_k - G \sum_{l(\neq k)} (\sqrt{k} + \sqrt{l}), \quad V_{ij}^1 = \frac{G}{2} (\sqrt{i} + \sqrt{j}), \quad V_{ij}^2 = V_{ij}^1 \quad (11.7)$$

### Energías de condensación

En la fig. 11.3 se muestra la energía de condensación como función del número de partículas para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV, MCGVAP y EXACTA.

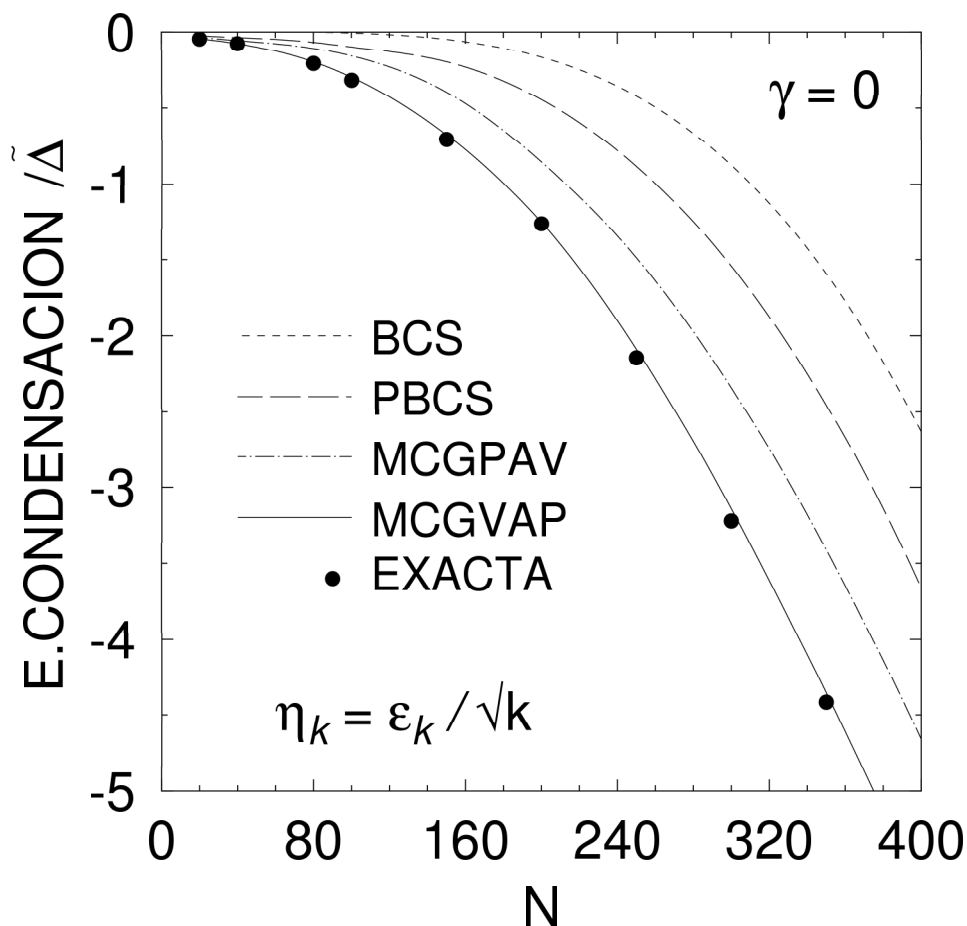


Figura 11.3: Energías de condensación de un sistema con un número de partículas par en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV, MCGVAP y la solución exacta.

Al cambiar la parametrización nos encontramos en general con un comportamiento muy distinto con respecto a la primera parametrización. Según la teoría BCS el sistema experimenta de nuevo una transición desde un estado no correlacionado a otro correlacionado a partir de  $N \approx 100$ , ocurriendo la transición de fase más tarde en esta parametrización que en la primera. A partir de ese momento, en la región de transición el sistema gana energía de forma aproximadamente lineal con el número de partículas hasta  $N \approx 200$ , posteriormente para  $N > 200$  la ganancia de energía no es lineal hasta que finalmente para la región de muchas partículas se encuentra de nuevo un comportamiento extensivo.

La teoría PBCS predice una evolución de la energía de condensación cualitativamente muy similar a la explicada en el caso BCS. Las diferencias más significativas son por un lado, que la teoría proyectada predice siempre energías más bajas que la aproximación BCS, desapareciendo por tanto la noción de transición de fase. Por otro lado notemos que con esta elección de los parámetros  $\eta_k$  la transición entre el régimen de pocas partículas al de muchas partículas no ocurre de

forma abrupta, como ha sido habitual en los anteriores casos, sino que por contra es suave.

La solución exacta nos permite comprobar que en efecto la transición entre ambos regímenes es suave. Sin embargo a pesar de la buena descripción de este hecho por la teoría proyectada, es incapaz de reproducir con precisión los valores de la energía exacta, incluso en la región de pocas partículas.

Para los métodos MCGPAV y MCGVAP encontramos los siguientes resultados. La curva MCGPAV es completamente similar al comportamiento de la curva PBCS, aunque obviamente ofrece mejores resultados que aquella, pues mejora la energía sustancialmente en todas las regiones. Para el caso MCGVAP encontramos satisfactoriamente de nuevo que es capaz no sólo de reproducir todas las peculiaridades comentadas anteriormente sino que una vez más a efectos prácticos no se puede distinguir de la trayectoria exacta. Podemos concluir de nuevo que el método MCGVAP trata de forma extremadamente eficaz las correlaciones de apareamiento incluso en una elección del hamiltoniano nada trivial como es el que ahora nos ocupa.

### Funciones de onda colectivas

Pasemos ahora a exponer los resultados que se obtienen para las funciones de onda colectivas asociadas a los cálculos con el MCG correspondientes a las cálculos realizados para las energías de condensación.

En la fig. 11.4 se muestran las funciones colectivas para esta aproximación como función de los números de partículas 20, 40, 80, 100, 200 y 400. El código para las curvas es el mismo que para la prescripción anterior.

En la tabla 11.2 mostramos los valores iniciales y finales del valor de la constante  $G$ , de modo que el valor inicial es el valor de  $G_c$  para cada aproximación.

$N$	20	40	80	100	200	400
$(G_i)_{PAV}$	0.040	0.013	0.003	0.0025	0.0007	0.0007
$(G_f)_{PAV}$	1.000	0.500	0.400	0.0800	0.0070	0.0040
$(G_i)_{VAP}$	0.002	0.002	0.001	0.0007	0.0003	0.00008
$(G_f)_{VAP}$	5.000	0.500	0.030	0.0500	0.0050	0.00500

Tabla 11.2: Valores iniciales  $G_i$  y finales  $G_f$  (medidos en meV) para la coordenada generadora usada en los cálculos. Los subíndices PAV (VAP) corresponden a las aproximaciones MCGPAV (MCGVAP).

De nuevo, según se observa en esta tabla, existe una zona del rango de  $G$  en ambas aproximaciones MCGPAV y MCGVAP que coincide. Esto da como resultado que al representarlas en términos de  $G - G_c$  las curvas MCGVAP queden por debajo de las MCGPAV.

Comencemos el análisis para  $N = 20$ . En este caso encontramos curvas de potencial que no corresponden a curvas parabólicas. Como observamos en ambas aproximaciones los dos potenciales están extraordinariamente abiertos, pasando de cóncavos (cerca del origen) a convexos. A pesar de ello las distribuciones de probabilidad de ambas aproximaciones son muy similares entre ellas,

justificando que en esta región ambas predicen energías de condensación casi iguales.

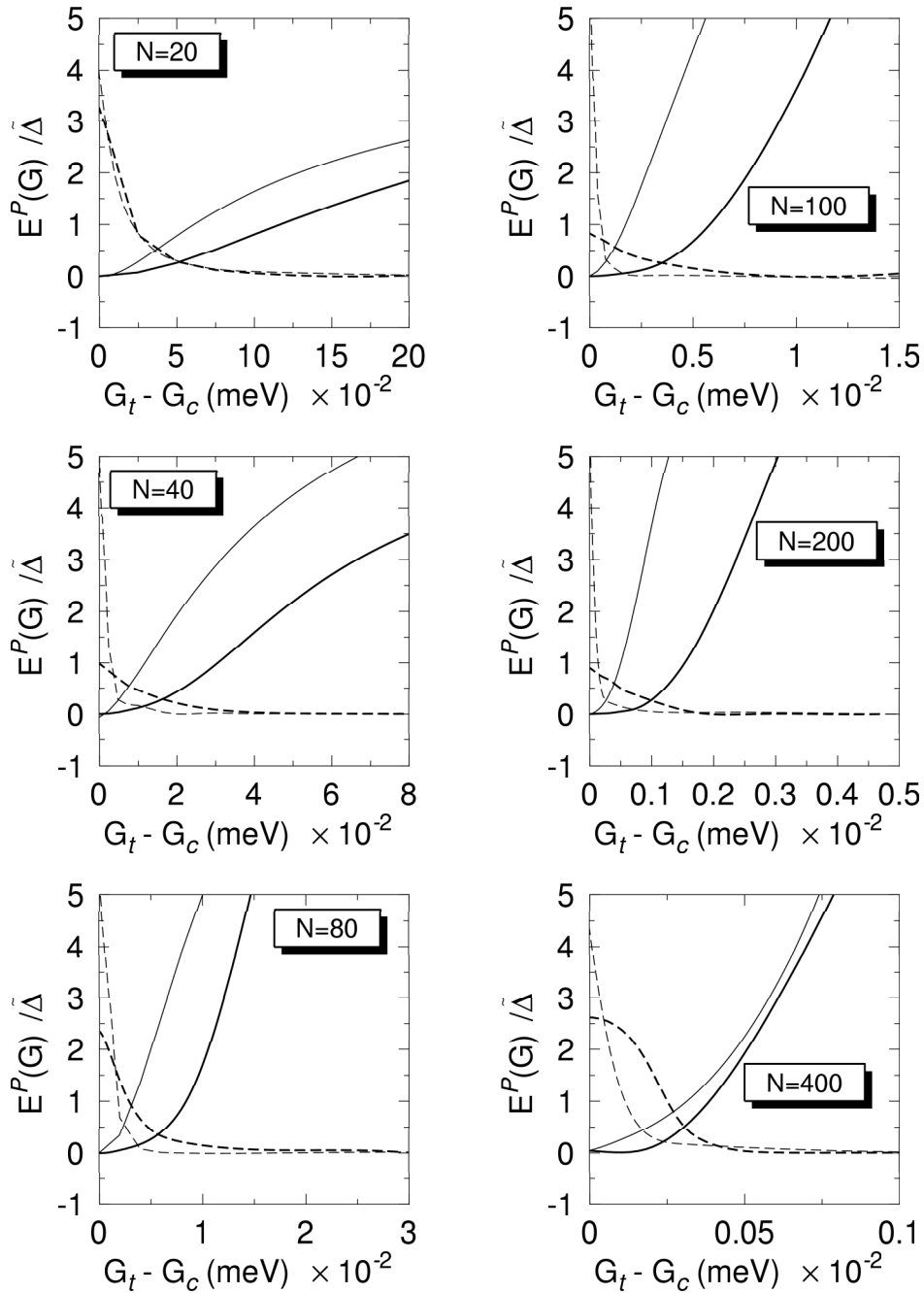


Figura 11.4: Funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  (en la figura  $|g(G)|^2$ ) (líneas discontinúas) y energías proyectadas (líneas continuas) como función de la constante de interacción  $G - G_c$  (ver significado de  $G_c$  en el texto) del estado fundamental de un sistema con un número de partículas par para las aproximaciones MCGPAV (líneas finas) y MCGVAP (líneas gruesas). La escala del eje de las ordenadas hace referencia a las unidades de energía  $E_P(G)/\tilde{\Delta}$ , los mínimos de las curvas de energía se han desplazado al origen de energías. El área que cubre las funciones colectivas es igual para las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

Para  $N = 40$  tenemos una situación muy parecida, la diferencia con  $N = 20$  reside en que la distribución de la probabilidad está más desplazada hacia valores mayores de  $G - G_c$  en el caso MCGVAP que en el MCGPAV, permitiendo así en la versión MCGVAP más fluctuaciones. Esto justifica la diferencia de energías de condensación que a partir de este número de partículas se comienza a observar en la fig. 11.4.

Para la región intermedia  $N = 80, 100$  y  $200$  los potenciales adquieren una forma parabólica destacando nuevamente que la distribución para el MCGPAV está completamente concentrada en valores pequeños de  $G - G_c$  mientras que la distribución MCGVAP permite ensanchar la distribución hacia valores más grandes.

Finalmente para  $N = 400$  ambos potenciales son ya prácticamente parabólicos, pero la distribución de probabilidad para la aproximación MCGVAP sigue estando más desplazada hacia valores mayores de  $G - G_c$ . Esto hace pensar que para esta parametrización no hemos alcanzado el régimen de muchas partículas, para el cual ambas distribuciones de probabilidad coincidan.

**Parametrización 3:**  $\eta_k = \epsilon_k / \sqrt{N + 1 - k}$

Estudiemos ahora la última elección de los parámetros  $\eta_k$  que hemos propuesto. Para esta parametrización se obtienen las interacciones siguientes:

$$\begin{aligned} \hat{\epsilon}_k &= \epsilon_k - G \sum_{l(\neq k)} \frac{\sqrt{N+1-i}(\epsilon_i - \epsilon_j)}{\epsilon_i \sqrt{N+1-j} - \epsilon_j \sqrt{N+1-i}}, \\ V_{ij}^1 &= \frac{G}{2} \frac{\sqrt{N+1-i}(\epsilon_i - \epsilon_j)}{\epsilon_i \sqrt{N+1-j} - \epsilon_j \sqrt{N+1-i}} \\ V_{ij}^2 &= V_{ij}^1 \end{aligned} \tag{11.8}$$

### Energías de condensación

En la fig. 11.5 se representa las energías de condensación para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV, MCGVAP y la solución exacta.

Como podemos observar la estructura de estas curvas es muy parecida a la que se obtuvo en la segunda parametrización. Esto es completamente esperable a partir de que las parametrizaciones son muy parecidas. En cambio aquí obtenemos una escala de energía mayor.

La curva BCS no predice ahora una transición de fase como en los ejemplos anteriores, o al menos queda desplazada hacia un número tan pequeño del número de partículas que no permite observarse. El resto del comportamiento de la curva BCS es completamente similar al que se obtuvo en la parametrización anterior, donde destaca de nuevo que la zona de transición entre ambos regímenes es del todo suave.

El método de la proyección mejora enormemente los resultados de la curva BCS pero no aporta nada nuevo y queda muy lejos de la solución exacta, sorprendentemente en todas las regiones, y por tanto tenemos que considerarla para esta parametrización como una mala aproximación.



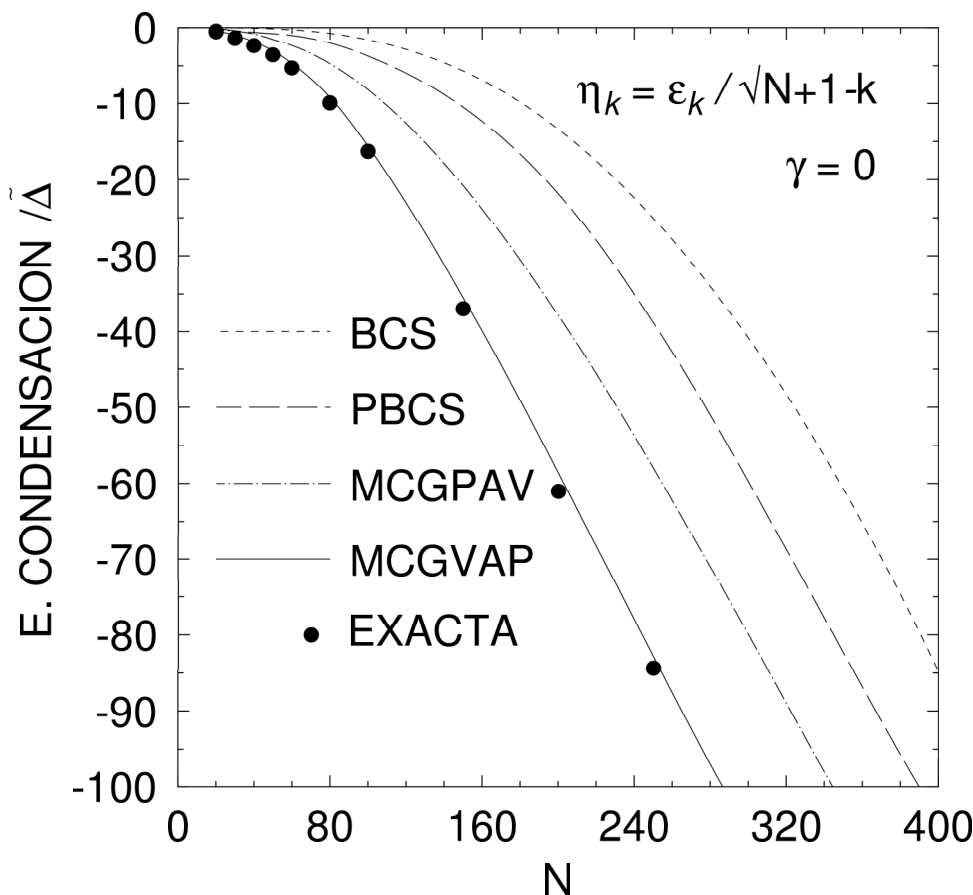


Figura 11.5: Energías de condensación de un sistema con un número de partículas par en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV, MCGVAP y la solución exacta.

El método MCGPAV mejora notablemente los resultados con la proyección, pero en esta ocasión no podemos considerarla una buena aproximación debido a la gran diferencia de energías. Nada de esto lo podemos aplicar a la aproximación MCGVAP, donde encontramos de nuevo un magnífico acuerdo con los resultados exactos, aunque con una precisión menor que en las parametrizaciones anteriores.

### Funciones de onda colectivas

Pasemos ahora a exponer los resultados que se obtienen para las funciones de onda colectivas asociadas a los cálculos con el MCG.

En la tabla 11.3 mostramos los valores iniciales y finales del valor de la constante  $G$ , de modo que el valor inicial es el valor de  $G_c$  para cada aproximación. Al igual que en las dos parametrizaciones anteriores esta tabla explica la posición relativa de los pozos de energía de las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

En la fig. 11.6 se muestran las funciones colectivas para esta aproximación como función de los números de partículas 20, 40, 80, 100, 200 y 400. El código para las curvas es el mismo que para la prescripción anterior.

Para  $N = 20, 40$  encontramos un comportamiento similar, los pozos de energía exhiben la

$N$	20	40	80	100	200	400
$(G_i)_{PAV}$	0.014	0.005	0.0017	0.001	0.0004	0.0004
$(G_f)_{PAV}$	0.044	0.015	0.0038	0.004	0.0009	0.0009
$(G_i)_{VAP}$	0.0008	0.001	0.0008	0.0003	0.0001	0.0004
$(G_f)_{VAP}$	0.0320	0.015	0.0027	0.0030	0.0006	0.0009

Tabla 11.3: Valores iniciales y finales para la coordenada generadora (medidos en meV) usada en los cálculos. Los subíndices PAV (VAP) corresponden a las aproximaciones MCGPAV (MCGVAP).

misma estructura tanto para la aproximación MCGPAV como MCGVAP, una curva asimétrica muy blanda a la izquierda de los mínimos y que recuerda una curva parabólica a la derecha de los mínimos. Esta estructura en los pozos se revela en las funciones de onda, donde son evidentes las oscilaciones, más acusadas para la aproximación MCGVAP así como la región en la cual se extienden.

A partir de  $N = 80$  obtenemos una situación muy diferente a la que encontramos para la región de pocas partículas. Ahora los pozos de energía recuperan una forma parabólica, cuyos mínimos se hacen más profundos y estrechos en función del aumento en el número de partículas. Los mínimos a su vez se desplazan a valores más pequeños en  $G - G_c$  conforme aumenta el número de partículas. Ambas aproximaciones evolucionan de una forma similar, hasta que para  $N = 200$  y  $N = 400$  obtenemos prácticamente la misma curva de energía. Por otro lado, las distribuciones de probabilidad evolucionan con una forma gaussiana, cuyo máximo está centrado en los mínimos de los pozos de potencial. Obtenemos una mayor anchura para las distribuciones predichas por MCGVAP, revelando así la presencia de mayores fluctuaciones. Finalmente para  $N = 200$  y  $N = 400$  obtenemos las mismas curvas, significando así que hemos alcanzado el límite de muchas partículas.

### 11.3.5. Modelo trigonométrico ( $\gamma = 1$ )

Pasemos ahora al análisis de los resultados obtenidos para la familia trigonométrica. En virtud de la forma que adquiere la interacción en este caso nos alejamos de cualquier semejanza con el hamiltoniano reducido BCS. Por tanto cualquier parametrización escogida no llevará a que el hamiltoniano pueda reescribirse en términos del hamiltoniano de apareamiento reducido, como sucedía en el caso de la familia racional cuando se escoge la primera parametrización.

Los elementos de la interacción quedan escritos de la forma siguiente:

$$\hat{\epsilon}_i = \epsilon_k - G \sum_{l(\neq i)} (\epsilon_i - \epsilon_l) \cot(\eta_i - \eta_l) \quad (11.9)$$

$$V_{ij}^1 = \frac{G}{2} \frac{(\epsilon_i - \epsilon_j)}{\sin(\eta_i - \eta_j)}, \quad (11.10)$$

$$V_{ij}^2 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \cot(\eta_i - \eta_j). \quad (11.11)$$

Al igual que hicimos en la familia racional estudiemos las tres parametrizaciones por separado:

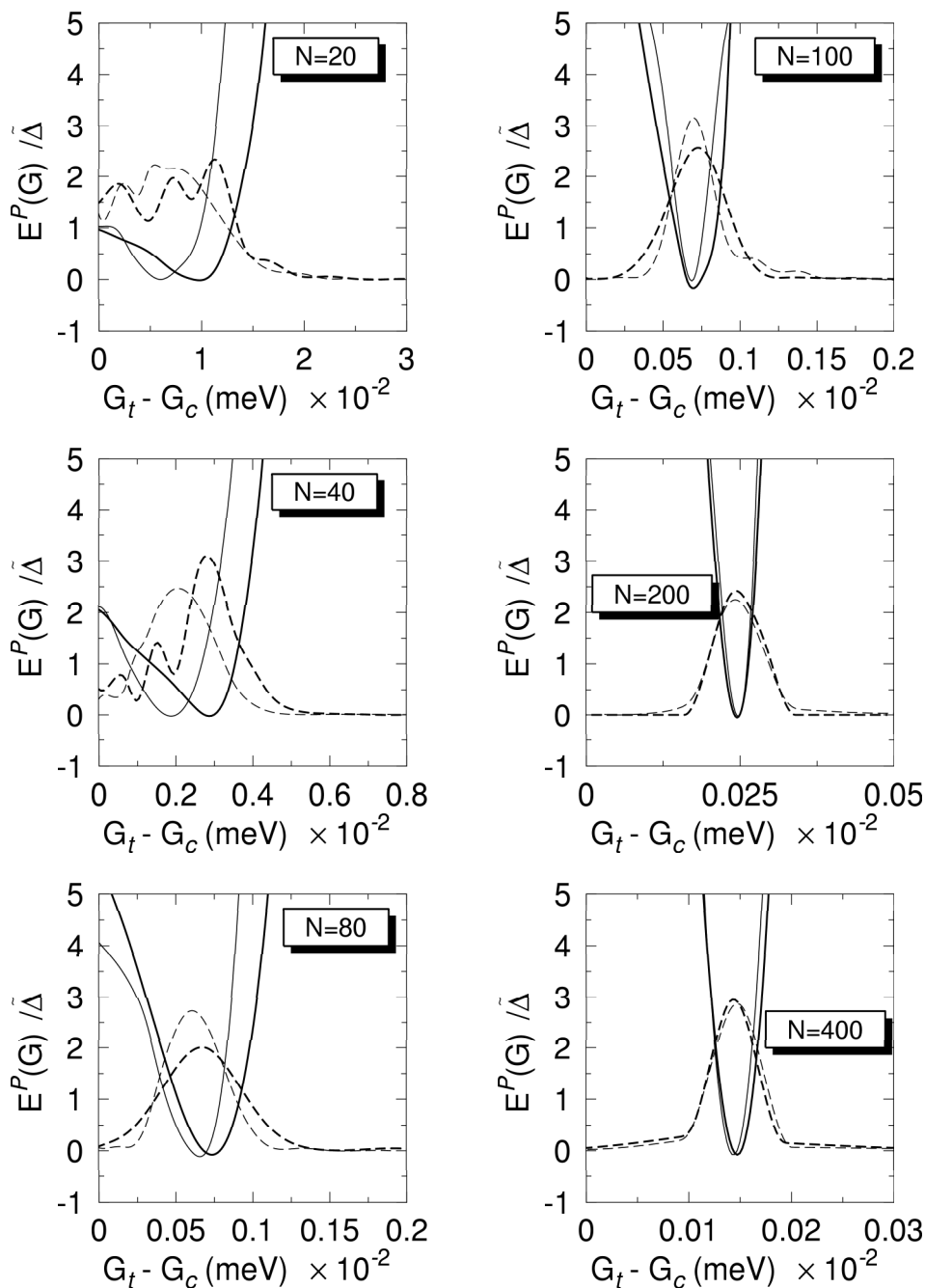


Figura 11.6: Funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  (en la figura  $|g(G)|^2$ ) (líneas discontinúas) y energías proyectadas (líneas contínuas) como función de la constante de interacción  $G - G_c$  (ver significado de  $G_c$  en el texto) del estado fundamental de un sistema con un número de partículas par para las aproximaciones MCGPAV (líneas finas) y MCGVAP (líneas gruesas). La escala del eje de las ordenadas hace referencia a las unidades de energía  $E_P(G)/\tilde{\Delta}$ , los mínimos de las curvas de energía se han desplazado al origen de energías. El área que cubre las funciones colectivas es igual para las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

## Parametrización 1: $\eta_k = \epsilon_k$

Como sabemos esta es la elección más sencilla posible. Pero ahora a diferencia del caso racional no obtendremos elementos de matriz constantes.

$$\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - G \sum_{l(\neq k)} (\epsilon_k - \epsilon_l) \cot(\epsilon_k - \epsilon_l) \quad (11.12)$$

$$V_{ij}^1 = \frac{G (\epsilon_i - \epsilon_j)}{2 \sin(\epsilon_i - \epsilon_j)} \quad (11.13)$$

$$V_{ij}^2 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \cot(\epsilon_i - \epsilon_j) \quad (11.14)$$

### Energías de condensación

En la fig. 11.7 se representan las energías de condensación para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

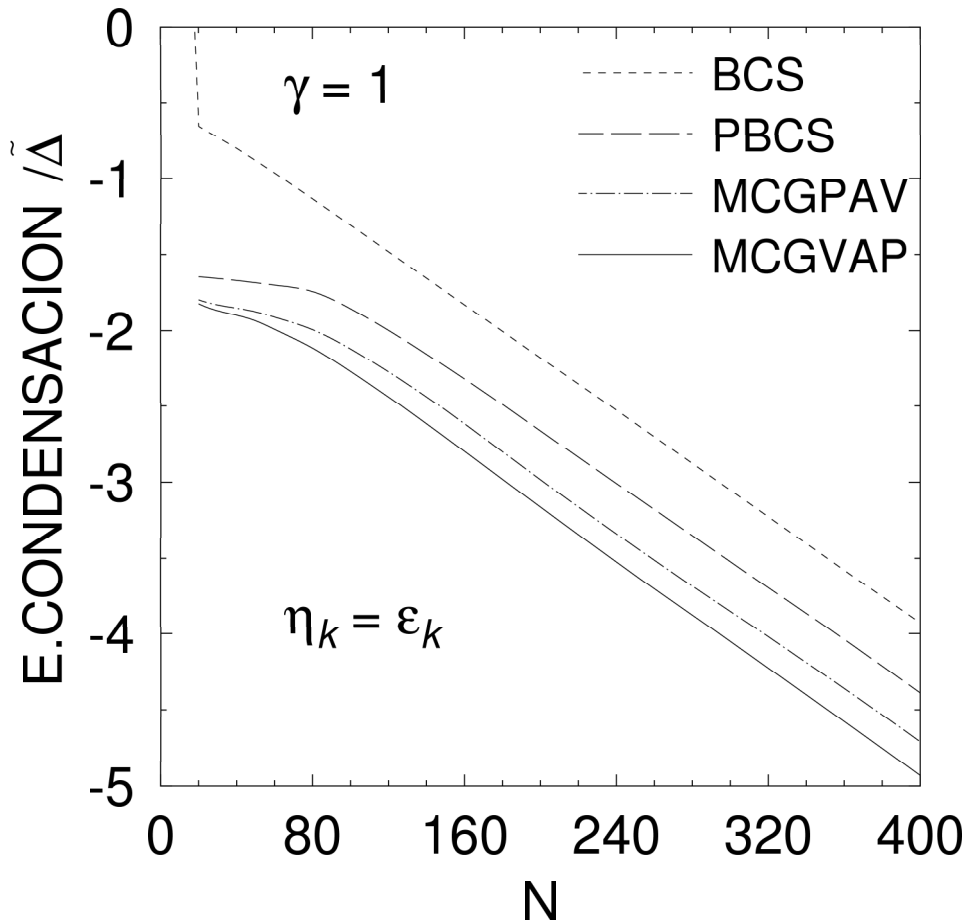


Figura 11.7: Energías de condensación de un sistema con un número de partículas par en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

Para la aproximación BCS obtenemos una situación que recuerda mucho la obtenida para la familia racional. La teoría BCS predice una transición de fase alrededor de  $N = 20$ . Desde este punto de vista la teoría BCS no modifica esencialmente los resultados obtenidos en la familia racional. A partir de  $N = 20$  el sistema gana energía linealmente.

Para la aproximación PBCS obtenemos una situación por completo diferente. Oviamente la transición BCS deja de existir, pero ahora al igual que obteníamos en el caso racional vuelve a obtenerse una transición abrupta entre el régimen de pocas partículas con muchas. En el régimen de pocas partículas el sistema se muestra prácticamente intensivo para posteriormente devenir extensivo.

Las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP cambian esta conclusión. La curva MCGPAV no verifica el resultado que acabamos de discutir para la aproximación PBCS. Aquí la transición aunque notable no es abrupta sino suave. Además las energías son siempre menores que para la aproximación PBCS. La curva MCGVAP está de acuerdo cualitativamente con lo planteado para MCGPAV, es decir, la transición entre el régimen de pocas y muchas partículas es suave. Pero ahora la predicción MCGVAP es mucho más suave que en los casos anteriores. Notemos sin embargo que la cercanía cuantitativa entre las dos aproximaciones basadas en el MCG hace que para esta parametrización la aproximación MCGPAV sea muy satisfactoria.

### Funciones de onda colectivas

Expongamos ahora las distribuciones de probabilidad para los cálculos realizados con el MCG.

En la tabla 11.4 mostramos los valores iniciales y finales del valor de la constante  $G$ , de modo que el valor inicial es el valor de  $G_c$  para cada aproximación. Encontramos de nuevo que para esta familia al igual que para las familias anteriores existe un rango de la coordenada  $G$  para la aproximación MCGPAV que coincide con el de la aproximación MCGVAP. Esta situación explica, como sabemos, la posición relativa de las energías proyectadas.

$N$	20	40	80	100	200	400
$(G_i)_{PAV}$	0.050	0.020	0.010	0.008	0.004	0.004
$(G_f)_{PAV}$	0.200	0.070	0.019	0.014	0.020	0.009
$(G_i)_{VAP}$	0.020	0.010	0.008	0.007	0.001	0.001
$(G_f)_{VAP}$	0.100	0.070	0.017	0.013	0.011	0.005

Tabla 11.4: Valores iniciales y finales para la coordenada generadora (medidos en MeV) usada en los cálculos. Los subíndices PAV (VAP) corresponden a las aproximaciones MCGPAV (MCGVAP).

En la fig. 11.8 se muestran las funciones colectivas para esta aproximación como función de los números de partículas 20, 40, 80, 100, 200 y 400.

Un examen rápido revela diferencias para todos los números de partículas. En general los pozos de energías tienen una estructura similar para ambas aproximaciones MCGPAV y MCGVAP. Existe una región amplia donde el pozo de energía es extraordinariamente plano a partir de la cual la energía crece rápidamente. Como observamos esta región es siempre más exagerada y extensa

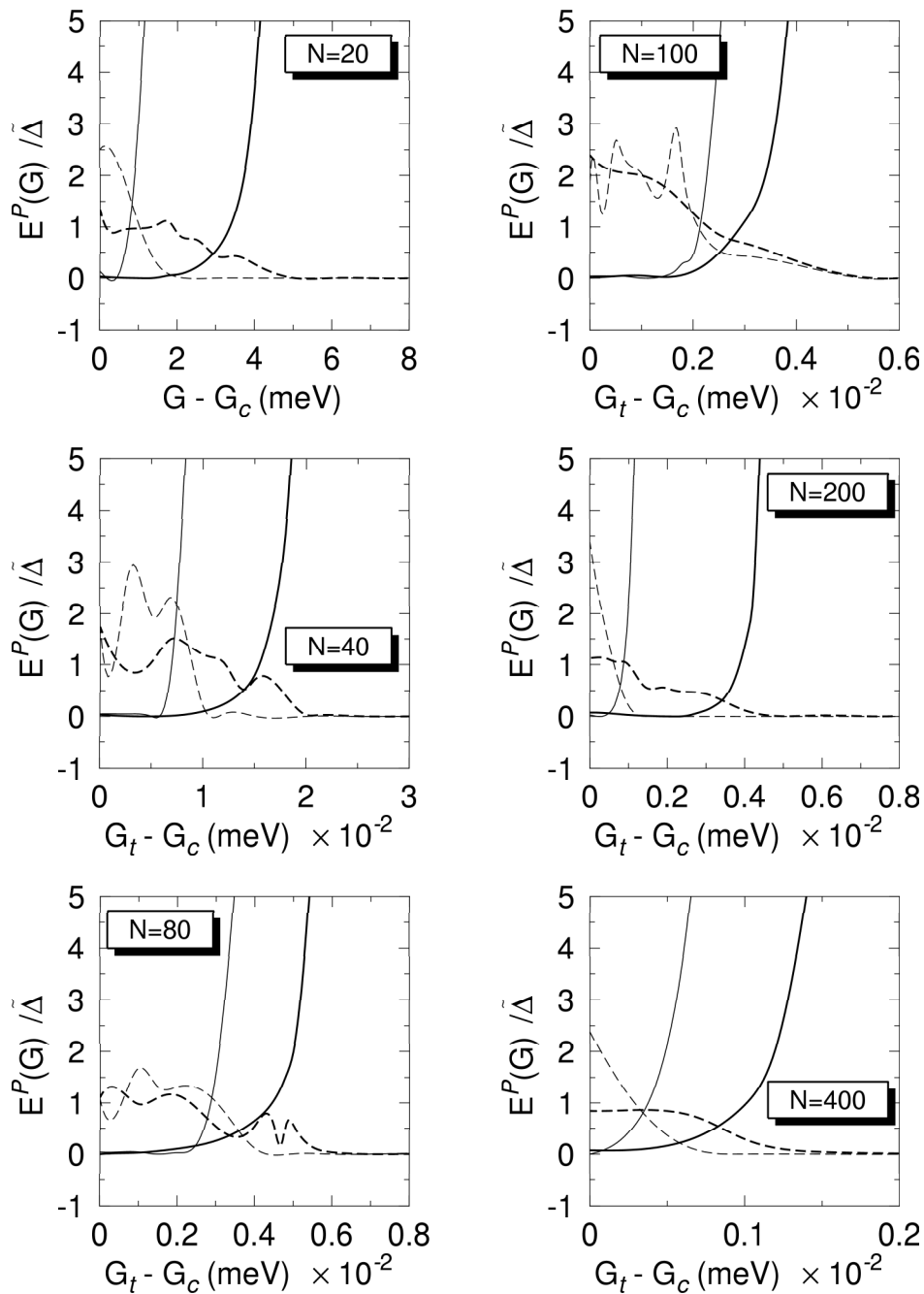


Figura 11.8: Funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  (en la figura  $|g(G)|^2$ ) (líneas discontinuas) y energías proyectadas (líneas continuas) como función de la constante de interacción  $G - G_c$  (ver significado de  $G_c$  en el texto) del estado fundamental de un sistema con un número de partículas par para las aproximaciones MCGPAV (líneas finas) y MCGVAP (líneas gruesas). La escala del eje de las ordenadas hace referencia a las unidades de energía  $E_P(G)/\tilde{\Delta}$ , los mínimos de las curvas de energía se han desplazado al origen de energías. El área que cubre las funciones colectivas es igual para las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

para la aproximación MCGVAP y disminuye conforme aumenta el número de partículas. Respecto de las distribuciones de probabilidad encontramos asimismo un comportamiento general. Las dis-

tribuciones dictadas por MCGPAV están centradas en los mínimos de los pozos, como por ejemplo para  $N = 20$ ,  $N = 200$  y  $N = 400$ . Encontramos también oscilaciones en las distribuciones debido al fuerte cambio en la pendiente de los pozos de potencial. Oviamente para MCGVAP las distribuciones de probabilidad están en general más extendidas en el espacio  $G - G_c$ , siguiendo así el comportamiento de los respectivos pozos de potencial. Las oscilaciones en las distribuciones están también presentes para la aproximación MCGVAP, siendo éstas más intensas en la región de pocas partículas, para posteriormente suavizarse a partir de  $N = 100$ .

**Parametrización 2:**  $\eta_k = \epsilon_k / \sqrt{k}$

Pasemos ahora a examinar los resultados que se obtienen para esta parametrización. En este caso los elementos de matriz vienen dadas por:

$$\epsilon \epsilon_k = \epsilon_k - G \sum_{l(\neq k)} (\epsilon_k - \epsilon_l) \cot \left( \frac{\epsilon_k}{\sqrt{k}} - \frac{\epsilon_l}{\sqrt{l}} \right) \tag{11.15}$$

$$V_{ij}^1 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \left( \sin \left( \frac{\epsilon_i}{\sqrt{i}} - \frac{\epsilon_j}{\sqrt{j}} \right) \right)^{-1} \tag{11.16}$$

$$V_{ij}^2 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \cot \left( \frac{\epsilon_i}{\sqrt{i}} - \frac{\epsilon_j}{\sqrt{j}} \right) \tag{11.17}$$

**Energías de condensación**

En la fig. 11.9 se representan las energías de condensación para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

En esta ocasión nos encontramos con un esquema que es muy parecido a la parametrización homóloga en la familia racional. La aproximación BCS no muestra una transición de fase como en la primera parametrización. En su lugar la curva BCS es siempre negativa para la región de pocas partículas. Hasta  $N = 100$  aproximadamente la energía es constante mostrando al sistema como intensivo. Posteriormente para  $N \gg 100$  el sistema gana energía durante la transición suavemente hasta que entra en el régimen de muchas partículas  $N \approx 300$  en el cual la ganancia de energía es lineal, comportándose el sistema como extensivo.

La curva PBCS reproduce en esencia la misma evolución que en la teoría BCS, aunque como es de esperar se obtienen energías menores en todas las regiones.

Las energías que predice el método MCGPAV están de acuerdo cualitativamente con lo predicho por las PBCS, aunque el ritmo de ganancia de energía es superior en este caso que en el proyectado. Finalmente para la aproximación MCGVAP la energía disminuye aún de forma más acusada, quedando un poco alejada la aproximación MCGPAV.

**Funciones de onda colectivas**

Expongamos ahora las distribuciones de probabilidad para los cálculos realizados con el MCG.

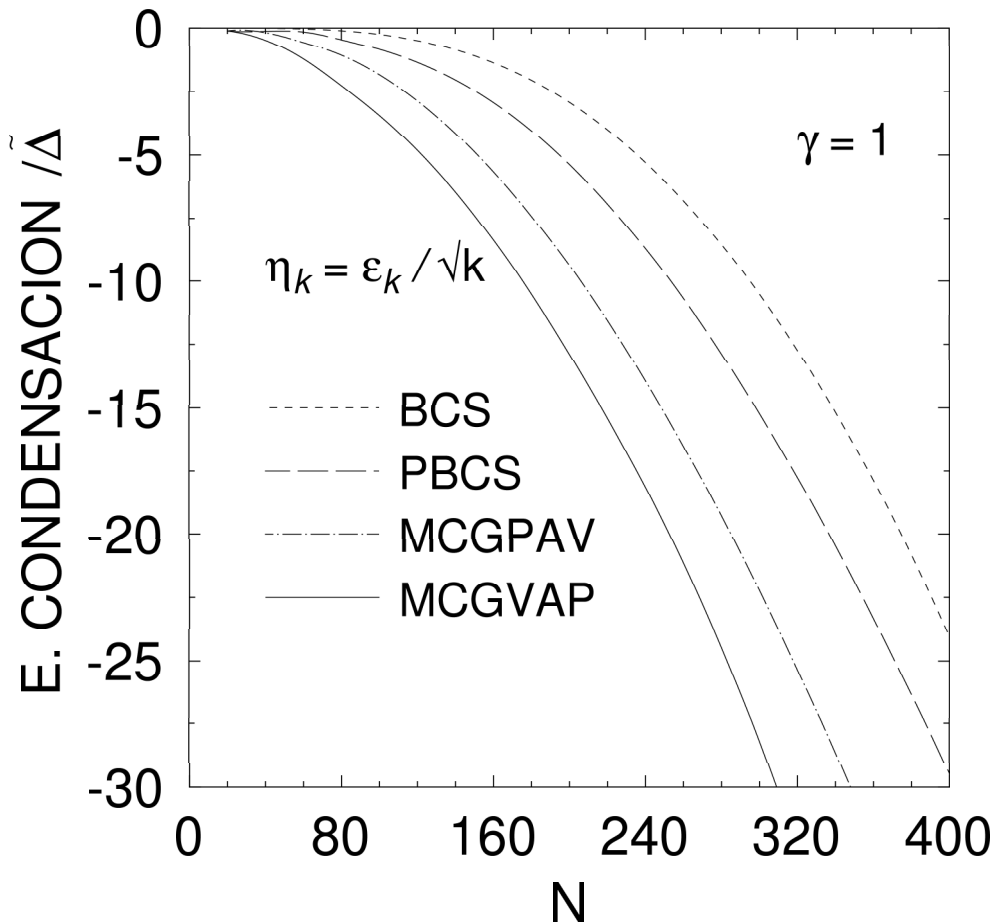


Figura 11.9: Energías de condensación de un sistema con un número de partículas par en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

En la tabla 11.5 mostramos los valores iniciales y finales del valor de la constante  $G$ , de modo que el valor inicial es el valor de  $G_c$  para cada aproximación. Se tiene de nuevo el solape entre ambos rangos correspondientes a la aproximación MCGPAV y MCGVAP.

$N$	20	40	80	100	200	400
$(G_i)_{PAV}$	0.040	0.010	0.003	0.003	0.0008	0.0008
$(G_f)_{PAV}$	1.800	0.080	0.150	0.070	0.0055	0.0038
$(G_i)_{VAP}$	0.010	0.010	0.005	0.004	0.0008	0.0008
$(G_f)_{VAP}$	1.200	1.200	0.150	0.100	0.0049	0.0040

Tabla 11.5: Valores iniciales y finales para la coordenada generadora (medidos en meV) usada en los cálculos. Los subíndices PAV (VAP) corresponden a las aproximaciones MCGPAV (MCGVAP).

En la fig. 11.10 se muestran las funciones colectivas para esta aproximación como función de los números de partículas 20, 40, 80, 100, 200 y 400.

Habiendo encontrado similitud entre las energías de condensación en esta parametrización de



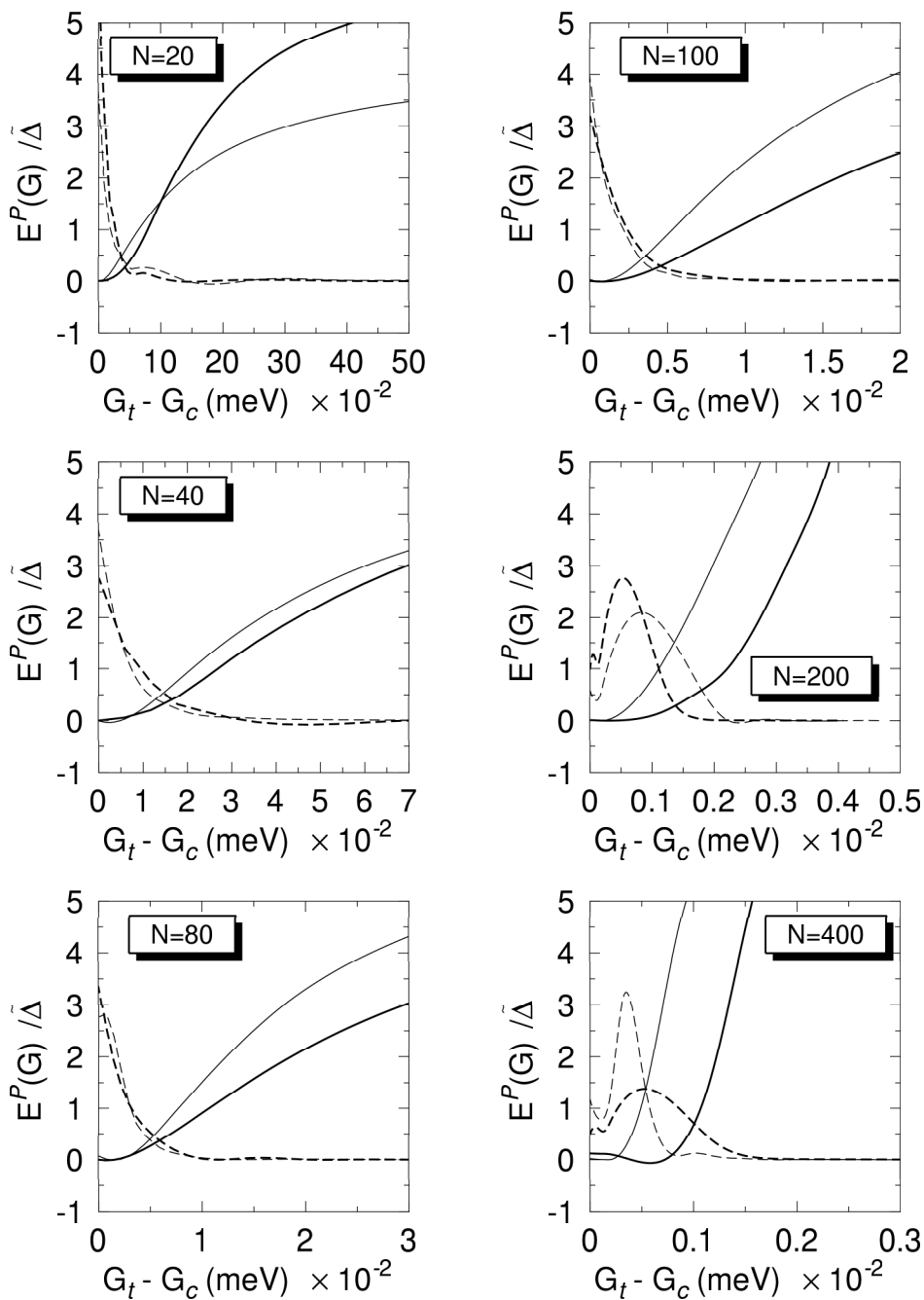


Figura 11.10: Funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  (en la figura  $|g(G)|^2$ ) (líneas discontinúas) y energías proyectadas (líneas continuas) como función de la constante de interacción  $G - G_c$  (ver significado de  $G_c$  en el texto) del estado fundamental de un sistema con un número de partículas par para las aproximaciones MCGPAV (líneas finas) y MCGVAP (líneas gruesas). La escala del eje de las ordenadas hace referencia a las unidades de energía  $E_P(G)/\tilde{\Delta}$ , los mínimos de las curvas de energía se han desplazado al origen de energías. El área que cubre las funciones colectivas es igual para las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

la familia trigonométrica y su homóloga de la familia racional es de esperar que suceda lo mismo para las distribuciones de probabilidad de las funciones de onda colectivas. En efecto, como

vemos la fig. 11.10 guarda parentesco con la mostrada en la fig. 11.4. En general los pozos de energía presentan un mínimo en valores cercanos a cero en el espacio  $G - G_c$  pero su estructura global está lejos de ser parabólica, al menos en la región de pocas partículas. La forma parabólica se recupera para número un grande de partículas. Como pauta general los pozos son más anchos según la aproximación MCGVAP.

Respecto de las distribuciones de probabilidad estas están fuertemente centradas en los mínimos de los pozos de energía, no apareciendo oscilaciones mas allá de los mínimos. De forma que no es muy relevante la estructura no parabólica de los pozos de energía que encontramos mas allá del mínimo. Conforme aumenta el número de partículas la distribución de probabilidad se hace mas suave hasta adoptar una forma acampanada para  $N = 200$  y  $N = 400$ . En esta ocasión no observamos diferencias sustanciales entre las distribuciones según MCGPAV y MCGVAP.

**Parametrización 3:**  $\eta_k = \epsilon_k / \sqrt{N + 1 - k}$

Por último analicemos los resultados obtenidos para esta parametrización en la que los elementos de matriz adoptan la forma:

$$\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - G \sum_{l(\neq k)} (\epsilon_k - \epsilon_l) \cotg \left( \frac{\epsilon_k}{\sqrt{N + 1 - k}} - \frac{\epsilon_l}{\sqrt{N + 1 - l}} \right) \quad (11.18)$$

$$V_{ij}^1 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \left( \sin \left( \frac{\epsilon_i}{\sqrt{N + 1 - i}} - \frac{\epsilon_j}{\sqrt{N + 1 - j}} \right) \right)^{-1} \quad (11.19)$$

$$V_{ij}^2 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \cotg \left( \frac{\epsilon_i}{\sqrt{N + 1 - i}} - \frac{\epsilon_j}{\sqrt{N + 1 - j}} \right) \quad (11.20)$$

### Energías de condensación

En la fig. 11.11 se representan las energías de condensación para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

De nuevo encontramos una situación muy parecida a la encontrada en la parametrización anterior y a la vez a su homóloga en la familia racional.

Para la aproximación BCS no observamos transición de fase pues la energía es siempre negativa. Se distinguen fácilmente el régimen intensivo que domina hasta  $N \approx 100$ , una zona de transición hasta  $N \approx 300$  y la posterior región extensiva. La curva PBCS guarda similitud con la descrita por la BCS, aunque siempre con energías por debajo de aquella. Las predicciones basadas en el MCG no modifican esta visión, salvando la mejora en las energías, que como es de esperar es muy superior en el MCGVAP. Notemos que la aproximación MCGPAV es idéntica a la MCGVAP en el rango de pocas partículas  $N = 20 - 40$ .

### Funciones de onda colectivas

Expongamos ahora las distribuciones de probabilidad para los cálculos realizados con el MCG.

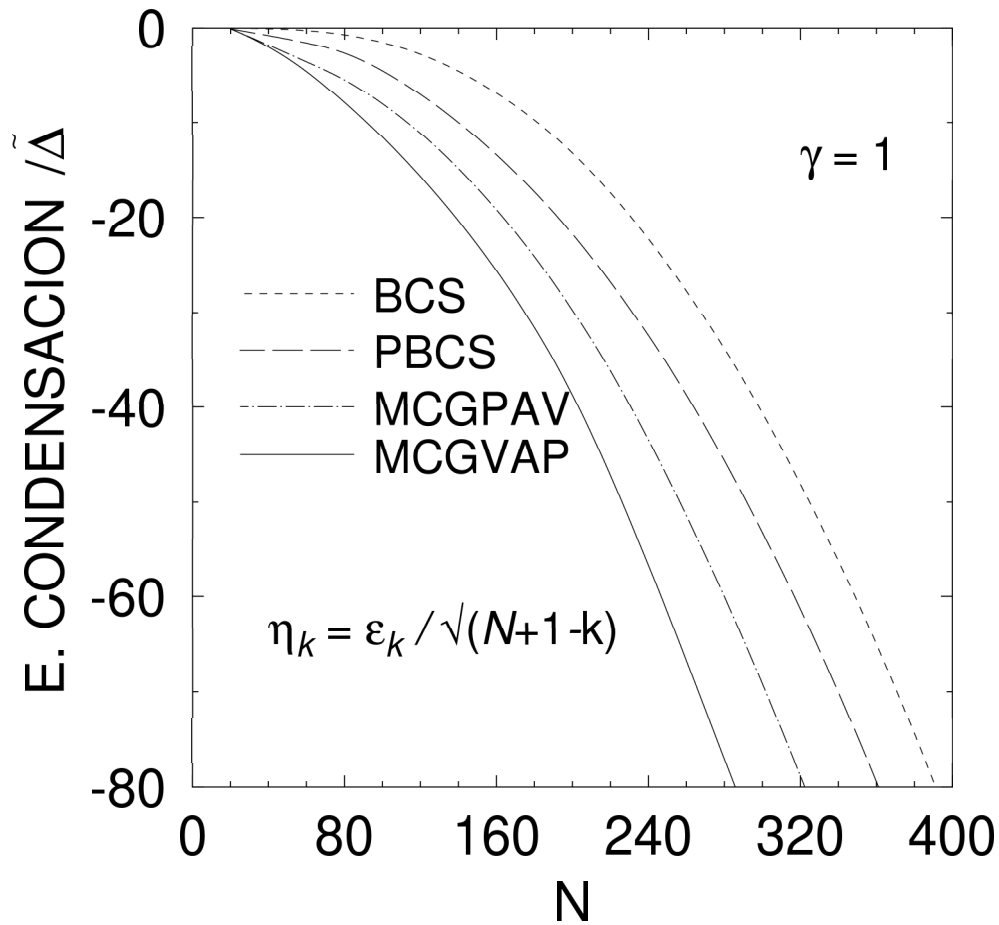


Figura 11.11: Energías de condensación de un sistema con un número de partículas par en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

En la tabla 11.3.5 mostramos los valores iniciales y finales del valor de la constante  $G$ , de modo que el valor inicial es el valor de  $G_c$  para cada aproximación.

$N$	20	40	80	100	200	400
$(G_i)_{PAV}$	0.015	0.004	0.0015	0.0008	0.0003	0.0003
$(G_f)_{PAV}$	0.040	0.010	0.0040	0.0025	0.0008	0.0008
$(G_i)_{VAP}$	0.005	0.002	0.0007	0.0004	0.0001	0.0001
$(G_f)_{VAP}$	0.025	0.007	0.0025	0.0014	0.0006	0.0006

Tabla 11.6: Valores iniciales y finales para la coordenada generadora (medidos en meV) usada en los cálculos. Los subíndices PAV (VAP) corresponden a las aproximaciones MCGPAV (MCGVAP).

En la fig. 11.12 se muestran las funciones colectivas para esta aproximación como función de los números de partículas 20, 40, 80, 100, 200 y 400.

Nuevamente encontramos pozos de energía que presentan una región extensa en la cual el pozo es plano en una zona grande del espacio  $G - G_c$ . Esta zona disminuye conforme aumenta el número

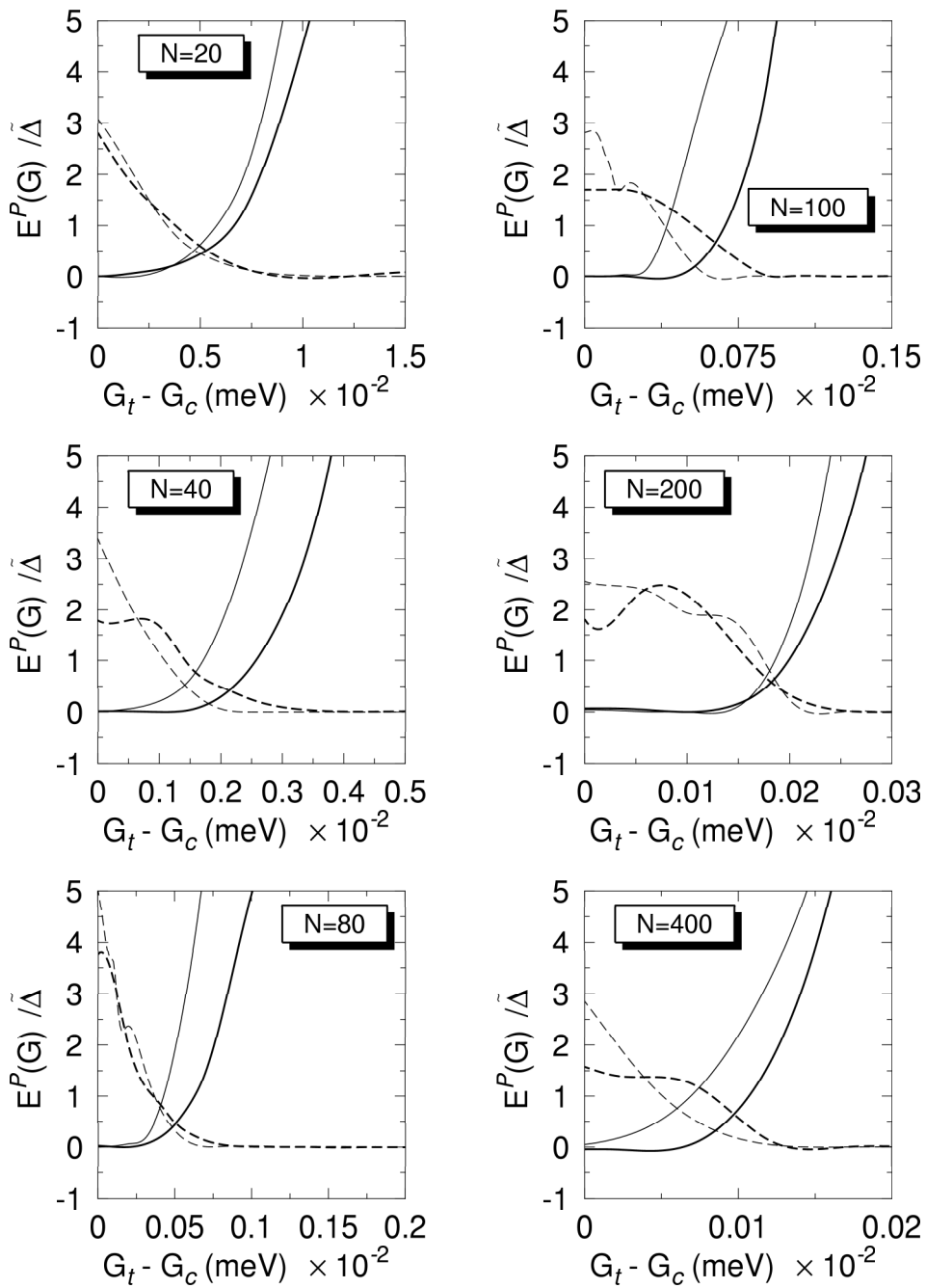


Figura 11.12: Funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  (en la figura  $|g(G)|^2$ ) (líneas discontinúas) y energías proyectadas (líneas contínuas) como función de la constante de interacción  $G - G_c$  (ver significado de  $G_c$  en el texto) del estado fundamental de un sistema con un número de partículas par para las aproximaciones MCGPAV (líneas finas) y MCGVAP (líneas gruesas). La escala del eje de las ordenadas hace referencia a las unidades de energía  $E_p(G)/\tilde{\Delta}$ , los mínimos de las curvas de energía se han desplazado al origen de energías. El área que cubre las funciones colectivas es igual para las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

de partículas. Como observamos la anchura del pozo es mayor en la aproximación MCGVAP, tal como obtuvimos en su homóloga la fig. 11.6. La distribución de probabilidad de las funciones de

onda está aproximadamente concentrado sobre la región plana que corresponde al potencial. La máxima probabilidad está desplazada hacia valores más pequeños en el caso de MCGPAV, siendo muy pronunciada en el caso de  $N = 20, 40, 80$  y  $N = 400$ . Las distribuciones MCGVAP admiten una distribución algo más extendida y con más oscilación para todas las regiones.

### 11.3.6. Modelo hiperbólico ( $\gamma = -i$ )

Por último pasemos al análisis de los cálculos realizados en la familia hiperbólica. Al igual que ocurre con la familia trigonométrica la interacción adquiere una forma que no puede reproducir la del hamiltoniano reducido BCS.

Los elementos de la interacción quedan escritos de la forma siguiente:

$$\hat{\epsilon}_i = \epsilon_k - G \sum_{l(\neq i)} (\epsilon_i - \epsilon_l) \coth(\eta_i - \eta_l) \quad (11.21)$$

$$V_{ij}^1 = \frac{G}{2} \frac{(\epsilon_i - \epsilon_j)}{\sinh(\eta_i - \eta_j)}, \quad (11.22)$$

$$V_{ij}^2 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \coth(\eta_i - \eta_j) \quad (11.23)$$

Al igual que hicimos en la familia racional estudiemos las tres parametrizaciones por separado:

#### Parametrización 1: $\eta_k = \epsilon_k$

Los elementos de matriz de la interacción toman la forma:

$$\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - G \sum_{l(\neq k)} (\epsilon_k - \epsilon_l) \coth(\epsilon_k - \epsilon_l) \quad (11.24)$$

$$V_{ij}^1 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \left( \sinh(\epsilon_i - \epsilon_j) \right)^{-1} \quad (11.25)$$

$$V_{ij}^2 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \coth(\epsilon_i - \epsilon_j). \quad (11.26)$$

#### Energías de condensación

En la fig. 11.13 se representan las energías de condensación para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

Con la aproximación BCS encontramos una transición de fase alrededor de  $N = 10$ , esta vez existe una pequeña región de transición alrededor de los números de partículas  $20 < N < 40$ . A partir de  $N = 40$  se encuentra la ganancia de energía vuelve a ser lineal en función del número de partículas, comportándose el sistema de forma extensiva.

La teoría proyectada asimismo implica una región de transición en el mismo intervalo que viene dado por la teoría BCS, aunque ahora las energías son menores y la transición entre ambos

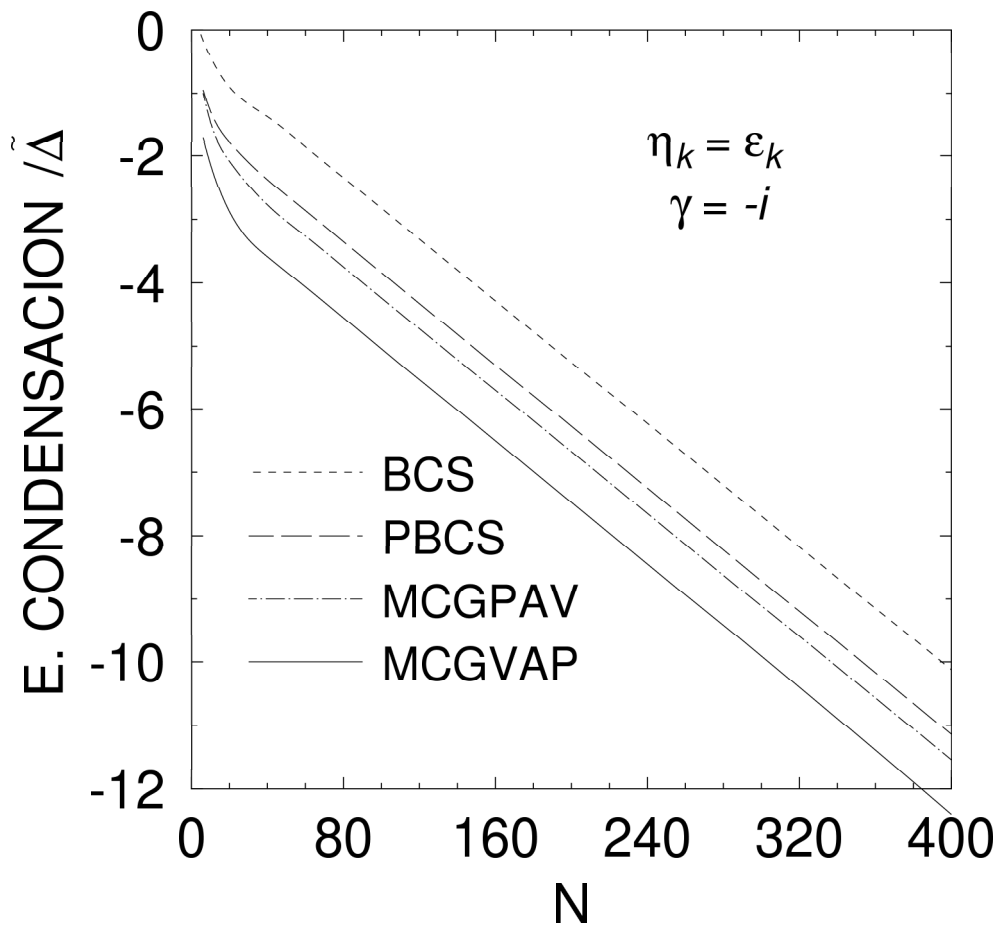


Figura 11.13: Energías de condensación de un sistema con un número de partículas par en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

regímenes está suavizada, y obviamente no aparece ninguna muestra de transición de fase. Exactamente igual encontramos el comportamiento extensivo característico a partir de  $N = 40$ .

La aproximación MCGPAV apenas mejora los resultados obtenidos por la teoría proyectada. Desplaza la transición entre ambos regímenes hacia un número de partículas mayor que en el caso PBCS, manteniendo la suavidad en la transición entre la región de pocas y muchas partículas. La aproximación MCGVAP mejora las energías y cambia significativamente los resultados obtenidos con MCGPAV. La transición entre ambos regímenes está ahora desplazada ligeramente hacia un número de partículas mayor, y acentúa un poco el ritmo (pendiente) de la ganancia de energía en la región de pocas partículas.

### Funciones de onda colectivas

Expongamos ahora las distribuciones de probabilidad para los cálculos realizados con el MCG.

En la tabla 11.7 mostramos los valores iniciales y finales del valor de la constante  $G$ , de modo que el valor inicial es el valor de  $G_c$  para cada aproximación.

$N$	20	40	80	100	200	400
$(G_i)_{PAV}$	0.080	0.07	0.010	0.0022	0.0010	0.0008
$(G_f)_{PAV}$	0.280	0.150	0.030	0.0270	0.0200	0.0180
$(G_i)_{VAP}$	0.001	0.0008	0.0006	0.0002	0.0001	0.0001
$(G_f)_{VAP}$	0.200	0.070	0.0300	0.0100	0.0400	0.0400

Tabla 11.7: Valores iniciales y finales para la coordenada generadora (medidas en meV) usada en los cálculos. Los subíndices PAV (VAP) corresponden a las aproximaciones MCGPAV (MCGVAP).

En la fig. 11.14 se muestran las funciones colectivas para esta aproximación como función de los números de partículas 20, 40, 80, 100, 200 y 400.

Los pozos de potencial poseen la estructura encontrada en la familia trigonométrica, es decir, existe una zona donde el pozo de energía es plano para posteriormente crecer rápidamente la energía y volverse una curva de aspecto parabólico. De nuevo, los pozos encontrados con MCGVAP aumentan dicha región y se vuelven más anchos que sus compañeros predichos por MCGPAV. Dicha zona es sustancialmente grande en la región de pocas partículas  $N = 20$  y  $N = 40$ . Como función del aumento del número de partículas los pozos descritos por MCGPAV y los MCGVAP se asemejan cada vez más. Así por ejemplo para  $N = 200$  y  $N = 400$  obtenemos prácticamente los mismos pozos. Respecto de las funciones de onda colectivas encontramos distribuciones muy pronunciadas en los mínimos de los pozos MCGPAV, en general desplazados hacia valores pequeños en el espacio  $G - G_c$ . Las distribuciones MCGVAP no presentan esos máximos tan pronunciados sino que por contra se encuentran ensanchados hacia valores mayores en  $G - G_c$ . A partir de  $N = 80$  esta estructura cambia significativamente pues las distribuciones tanto MCGPAV como MCGVAP se vuelven prácticamente idénticas.

### Parametrización 2: $\eta_k = \epsilon_k / \sqrt{k}$

Los elementos de matriz de la interacción toman la forma:

$$\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - G \sum_{l(\neq k)} (\epsilon_k - \epsilon_l) \coth\left(\frac{\epsilon_k}{\sqrt{k}} - \frac{\epsilon_l}{\sqrt{l}}\right) \quad (11.27)$$

$$V_{ij}^1 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \left( \sinh\left(\frac{\epsilon_i}{\sqrt{i}} - \frac{\epsilon_j}{\sqrt{j}}\right) \right)^{-1} \quad (11.28)$$

$$V_{ij}^2 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \coth\left(\frac{\epsilon_i}{\sqrt{i}} - \frac{\epsilon_j}{\sqrt{j}}\right) \quad (11.29)$$

### Energías de condensación

En la fig. 11.15 se representan las energías de condensación para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

Como ya es habitual en esta parametrización en la teoría BCS no se observa una transición de fase sino que en la región de pocas partículas la energía es negativa (aunque pequeña) y el sistema

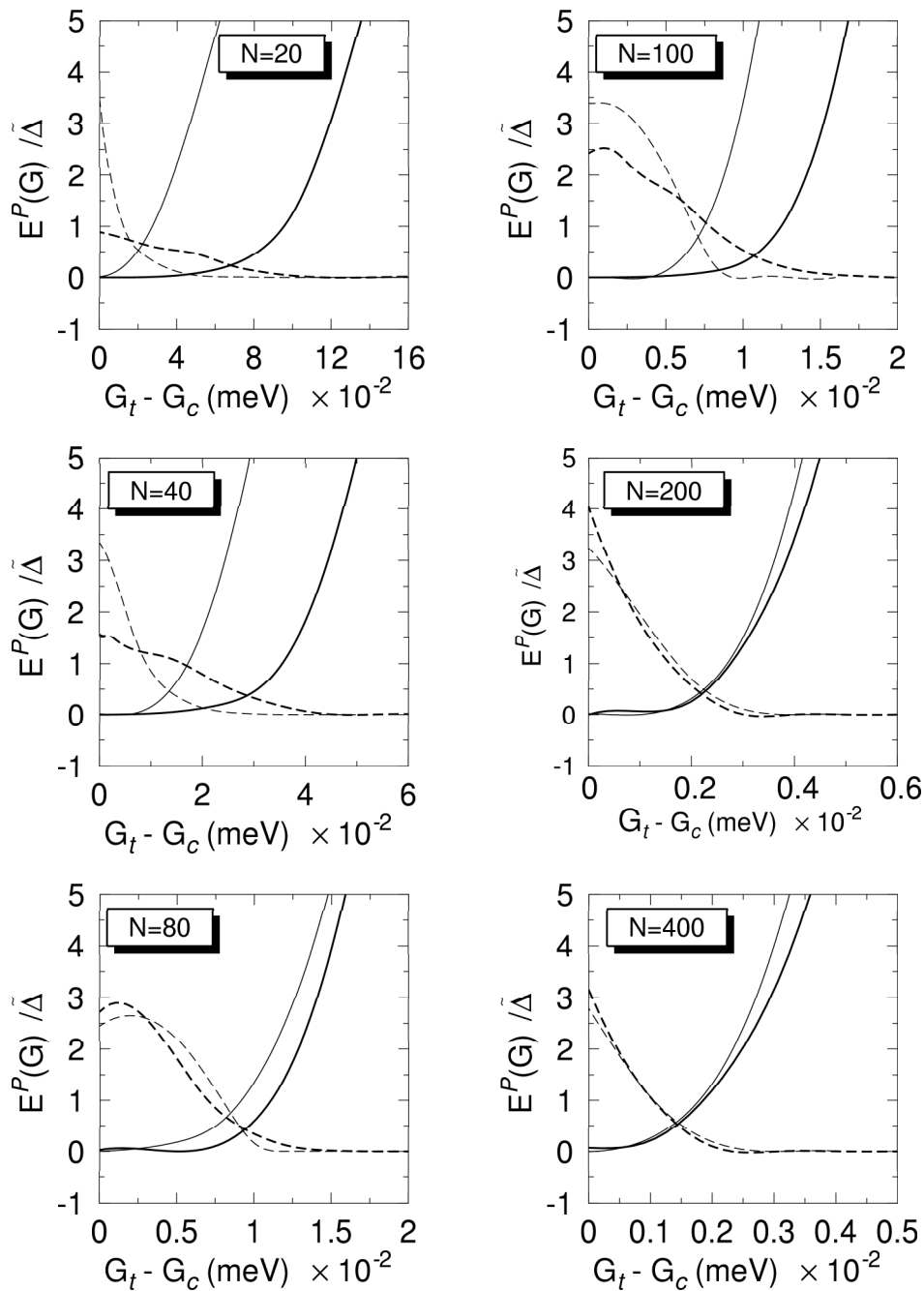


Figura 11.14: Funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  (en la figura  $|g(G)|^2$ ) (líneas discontinúas) y energías proyectadas (líneas continuas) como función de la constante de interacción  $G - G_c$  (ver significado de  $G_c$  en el texto) del estado fundamental de un sistema con un número de partículas par para las aproximaciones MCGPAV (líneas finas) y MCGVAP (líneas gruesas). La escala del eje de las ordenadas hace referencia a las unidades de energía  $E_p(G)/\tilde{\Delta}$ , los mínimos de las curvas de energía se han desplazado al origen de energías. El área que cubre las funciones colectivas es igual para las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

se comporta de forma intensiva hasta aproximadamente  $N = 100$  donde comienza una transición suave entre el régimen de pocas y muchas partículas para que finalmente el sistema devenga ex-



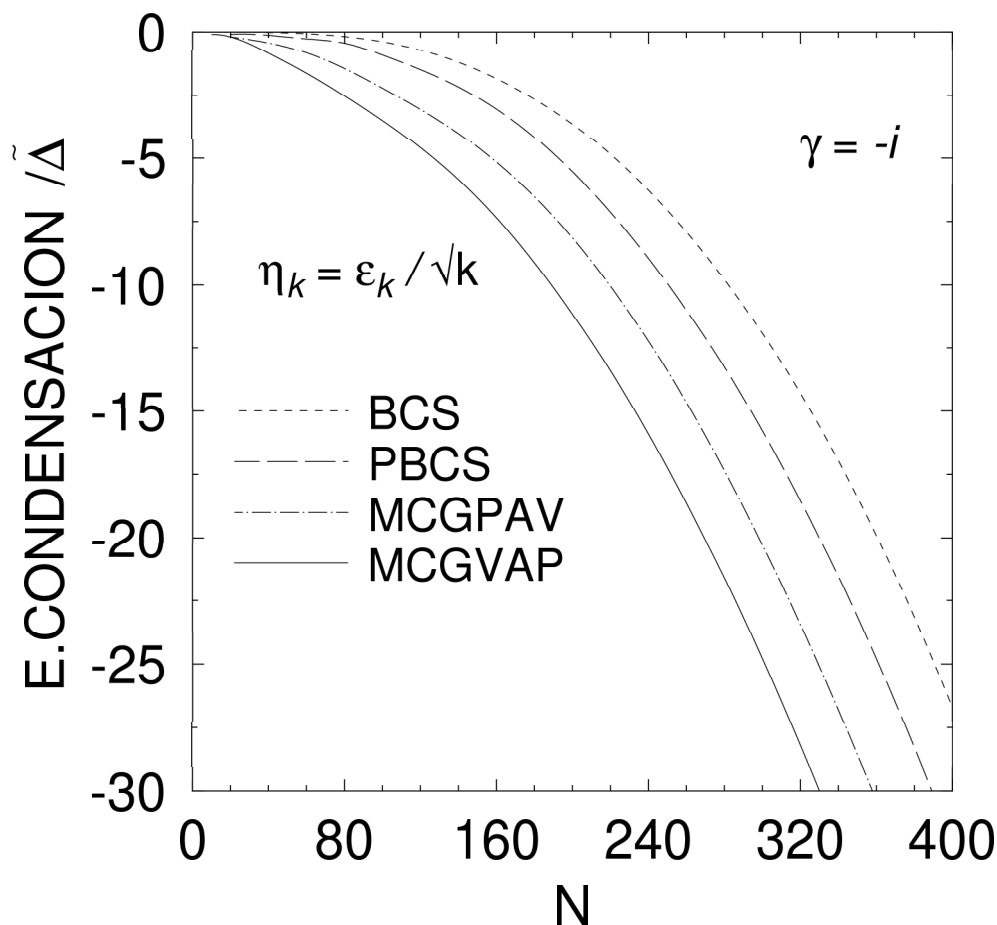


Figura 11.15: Energías de condensación de un sistema con un número de partículas par en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

tensivo.

La teoría PBCS disminuye las energías obtenidas mediante la teoría BCS pero mantiene cualitativamente los rasgos comentados anteriormente. Una suave transición entre los regímenes entre pocas y muchas partículas.

La teoría basada en MCGPAV disminuye más las energías respecto de la teoría proyectada y acentúa el ritmo de ganancia de energía en la región de pocas partículas. Con la MCGVAP se obtiene un incremento considerable en la ganancia de energía en la región de pocas partículas y la transición entre los regímenes de pocas y muchas partículas sucede antes en el número de partículas que en los casos anteriores.

#### Funciones de onda colectivas

Expongamos ahora las distribuciones de probabilidad para los cálculos realizados con el MCG.

En la fig. 11.16 se muestran las funciones colectivas para esta aproximación como función de los números de partículas 20, 40, 80, 100, 200 y 400.

En la tabla 11.8 mostramos los valores iniciales y finales del valor de la constante  $G$ , de modo que el valor inicial es el valor de  $G_c$  para cada aproximación.

$N$	20	40	80	100	200	400
$(G_i)_{PAV}$	0.015	0.005	0.0015	0.0010	0.0003	0.0003
$(G_f)_{PAV}$	0.050	0.030	0.0040	0.0030	0.0006	0.0006
$(G_i)_{VAP}$	0.003	0.001	0.0007	0.0005	0.0002	0.0002
$(G_f)_{VAP}$	0.025	0.030	0.0024	0.0014	0.0005	0.0004

Tabla 11.8: Valores iniciales y finales para la coordenada generadora (medidas en meV) usada en los cálculos. Los subíndices PAV (VAP) corresponden a las aproximaciones MCGPAV (MCGVAP).

Los pozos de potencial exhiben un comportamiento similar a los observados en los homólogos de la familia trigonométrica. Presentan mínimos profundos cerca del origen y rápidamente la energía aumenta para adquirir una estructura que en función del número de partículas cambia. Así por ejemplo, para la región de pocas partículas  $N = 20$  y  $N = 40$  el potencial adquiere una forma abierta (muy acusada para el caso  $N = 20$ ) la cual conforme aumenta el número de partículas los pozos se van cerrando hasta adquirir una forma parabólica en los casos  $N = 200$  y  $N = 400$ . En general la anchura de los pozos es mayor para la predicción MCGVAP. Las distribuciones de probabilidad presentan máximos acusados en los mínimos de los pozos, los cuales son menores para el caso MCGVAP. La anchura de las distribuciones también es generalmente mayor para el caso MCGVAP respecto de la aproximación MCGPAV.

### Parametrización 3: $\eta_k = \epsilon_k / \sqrt{N + 1 - k}$

Los elementos de matriz de la interacción toman la forma:

$$\hat{\epsilon}_k = \epsilon_k - G \sum_{l(\neq k)} (\epsilon_k - \epsilon_l) \coth \left( \frac{\epsilon_k}{\sqrt{N + 1 - k}} - \frac{\epsilon_l}{\sqrt{N + 1 - l}} \right) \quad (11.30)$$

$$V_{ij}^1 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \left( \sinh \left( \frac{\epsilon_i}{\sqrt{N + 1 - i}} - \frac{\epsilon_j}{\sqrt{N + 1 - j}} \right) \right)^{-1} \quad (11.31)$$

$$V_{ij}^2 = \frac{G}{2} (\epsilon_i - \epsilon_j) \coth \left( \frac{\epsilon_i}{\sqrt{N + 1 - j}} - \frac{\epsilon_j}{\sqrt{N + 1 - j}} \right) \quad (11.32)$$

### Energías de condensación

En la fig. 11.17 se representan las energías de condensación para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

Las energías de condensación no son muy distintas cualitativamente a las que se obtienen en la parametrización anterior. Las energías según la teoría BCS son siempre negativas e inducen una suave transición entre el régimen de pocas y muchas partículas, a la vez que el sistema pasa de ser

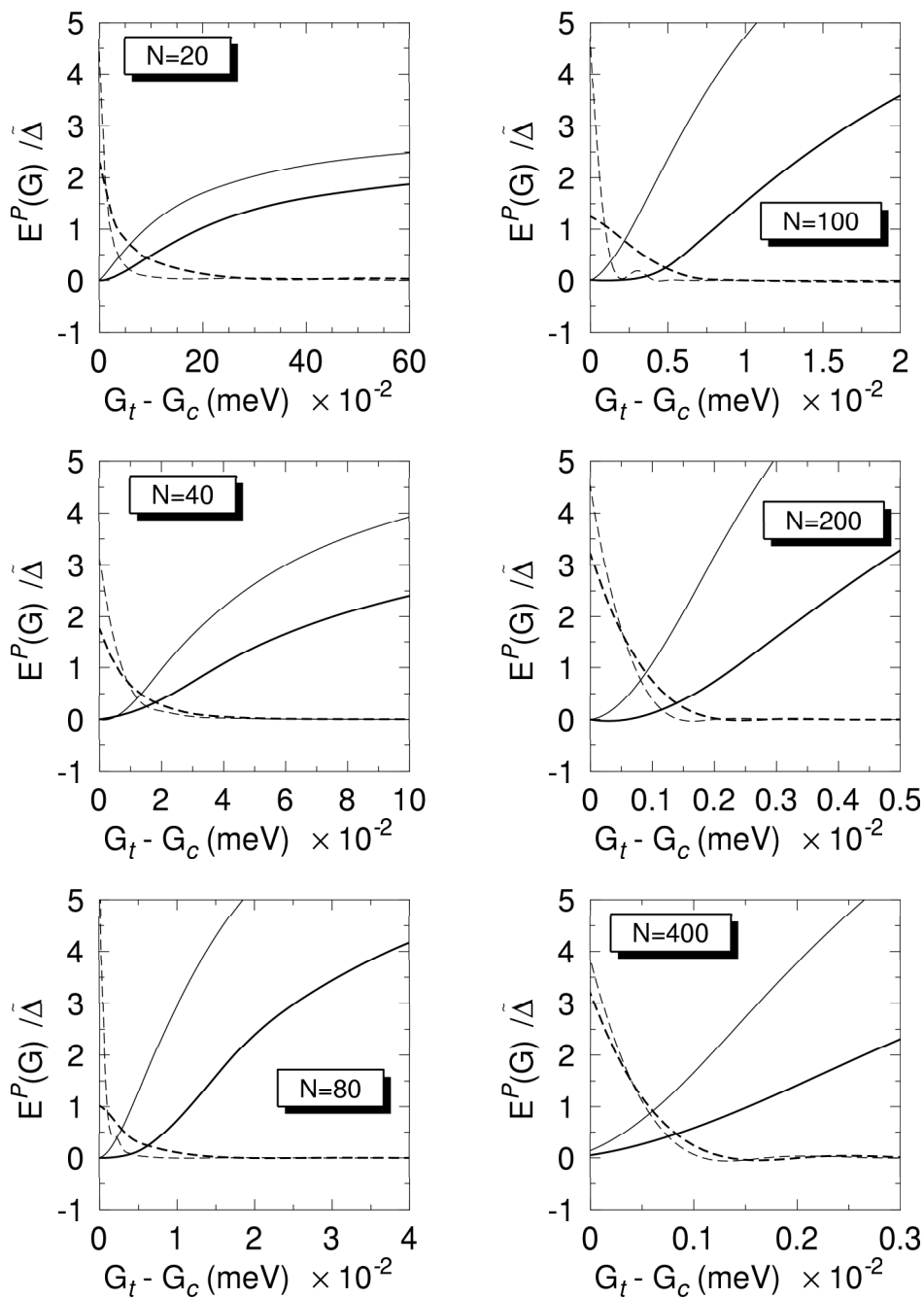


Figura 11.16: Funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  (en la figura  $|g(G)|^2$ ) (líneas discontinúas) y energías proyectadas (líneas continuas) como función de la constante de interacción  $G - G_c$  (ver significado de  $G_c$  en el texto) del estado fundamental de un sistema con un número de partículas par para las aproximaciones MCGPAV (líneas finas) y MCGVAP (líneas gruesas). La escala del eje de las ordenadas hace referencia a las unidades de energía  $E_P(G)/\tilde{\Delta}$ , los mínimos de las curvas de energía se han desplazado al origen de energías. El área que cubre las funciones colectivas es igual para las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

intensivo a extensivo.

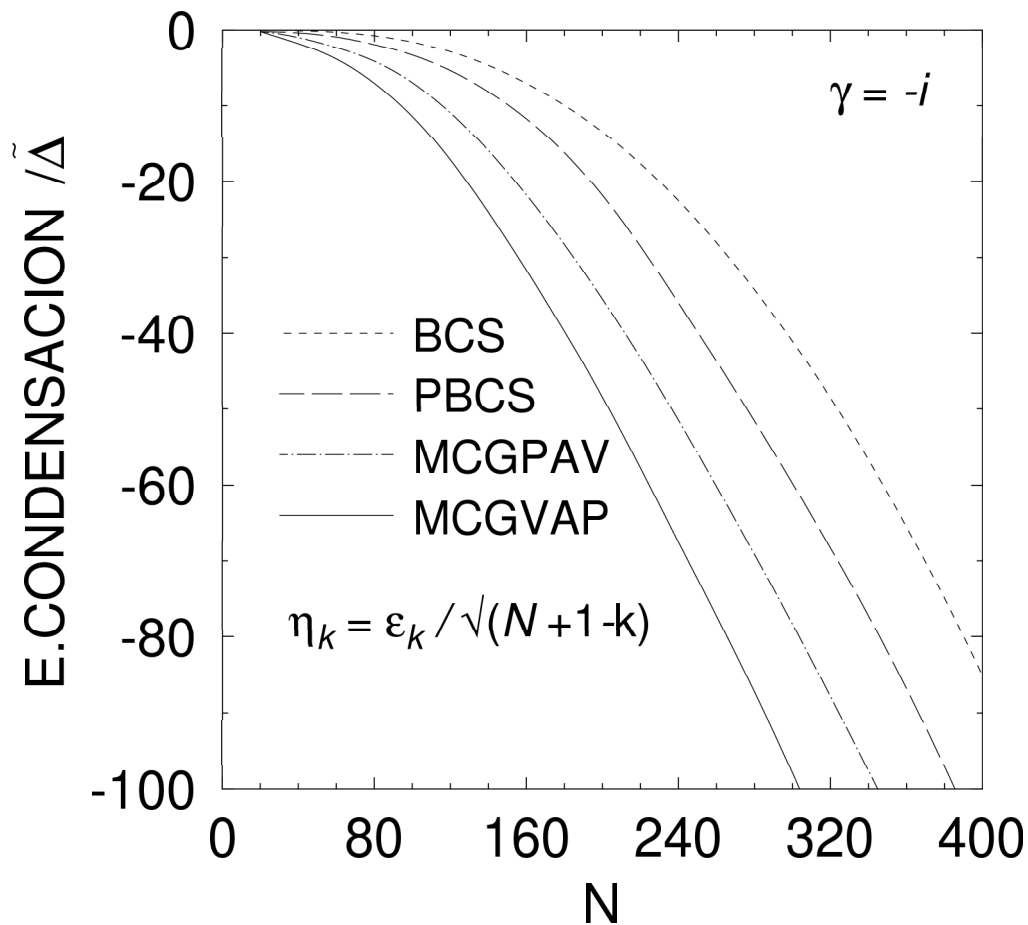


Figura 11.17: Energías de condensación de un sistema con un número de partículas par en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

La predicción PBCS no modifica esencialmente los resultados de la teoría BCS aunque disminuye las energías considerablemente y mantiene la transición suave entre ambos regímenes.

Los cálculos realizados con el método MCGPAV disminuyen a su vez las energías de la teoría proyectada mostrando la misma transición suave pero con mayor ritmo en la ganancia de la energía. Por último la aproximación MCGVAP disminuye más las energías de MCGPAV y acelera la transición entre los regímenes de pocas y muchas partículas que en este sucede en un espacio del número de partículas menor.

### Funciones de onda colectivas

Expongamos ahora las distribuciones de probabilidad para los cálculos realizados con el MCG.

En la tabla 11.9 mostramos los valores iniciales y finales del valor de la constante  $G$ , de modo que el valor inicial es el valor de  $G_c$  para cada aproximación.

En la fig. 11.18 se muestran las funciones colectivas para esta aproximación como función de los números de partículas 20, 40, 80, 100, 200 y 400.

$N$	20	40	80	100	200	400
$(G_i)_{PAV}$	0.015	0.005	0.0015	0.0010	0.0003	0.0003
$(G_f)_{PAV}$	0.050	0.030	0.0040	0.0030	0.0006	0.0006
$(G_i)_{VAP}$	0.003	0.001	0.0007	0.0005	0.0002	0.0002
$(G_f)_{VAP}$	0.025	0.030	0.0024	0.0014	0.0005	0.0004

Tabla 11.9: Valores iniciales y finales para la coordenada generadora (medidas en meV) usada en los cálculos. Los subíndices PAV (VAP) corresponden a las aproximaciones MCGPAV (MCGVAP).

En esta ocasión nos encontramos con pozos de potencial que son planos en una zona cerca del origen. A partir de esa zona la energía del pozo crece rápidamente y adquiere una forma parabólica. No se observa la misma estructura abierta que dominaba para la parametrización anterior y si un aspecto más parabólico. Nuevamente el pozo predicho por MCGVAP es en general más ancho que la distribución MCGPAV y aumenta la zona cerca del origen donde el pozo es más plano. Conforme aumenta el número de partículas los pozos se van haciendo cada vez más similares. Las distribuciones de probabilidad de las funciones colectivas muestran máximos pronunciados en los mínimos de los pozos para la aproximación MCGPAV mientras que para la correspondiente a MCGVAP estas distribuciones están más abiertas y desplazadas hacia valores más grandes en el espacio  $G - G_c$ .

## 11.4 Hamiltoniano sin solución exacta

Asimismo hemos querido estudiar un ejemplo de hamiltoniano que no sea integrable. Hemos propuesto utilizar la forma general del hamiltoniano generalizado de apareamiento:

$$H = \sum_k \hat{\epsilon}_k n_k + \sum_{ij} V_{ij}^1 A_i^\dagger A_j + \sum_{ij} V_{ij}^2 n_i n_j. \quad (11.33)$$

Donde ahora los elementos de matriz que fijan la interacción  $V_{ij}^1$  y  $V_{ij}^2$  están dados por números *aleatorios* entre -1 y 0. De modo que la interacción es atractiva.

Para representar las energías de condensación hemos realizado los cálculos de la forma siguiente. Fijado un número de partículas hemos calculado la energía de condensación un número  $\Omega$  de veces para cada una de las aproximaciones. Representaremos la energía de condensación media  $\langle E_C \rangle = \sum_{i=1}^{\Omega} E_{COND}^i / \Omega$ .

En la fig. 11.19 se representan estas energías de condensación medias para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP.

Empecemos por el análisis de los resultados obtenidos mediante la teoría BCS. Obtenemos una transición de fase a partir de  $N = 20$ . En la región de pocas partículas encontramos que la energía media es casi nula. Hasta aproximadamente  $N = 160$  el sistema es claramente intensivo. A partir

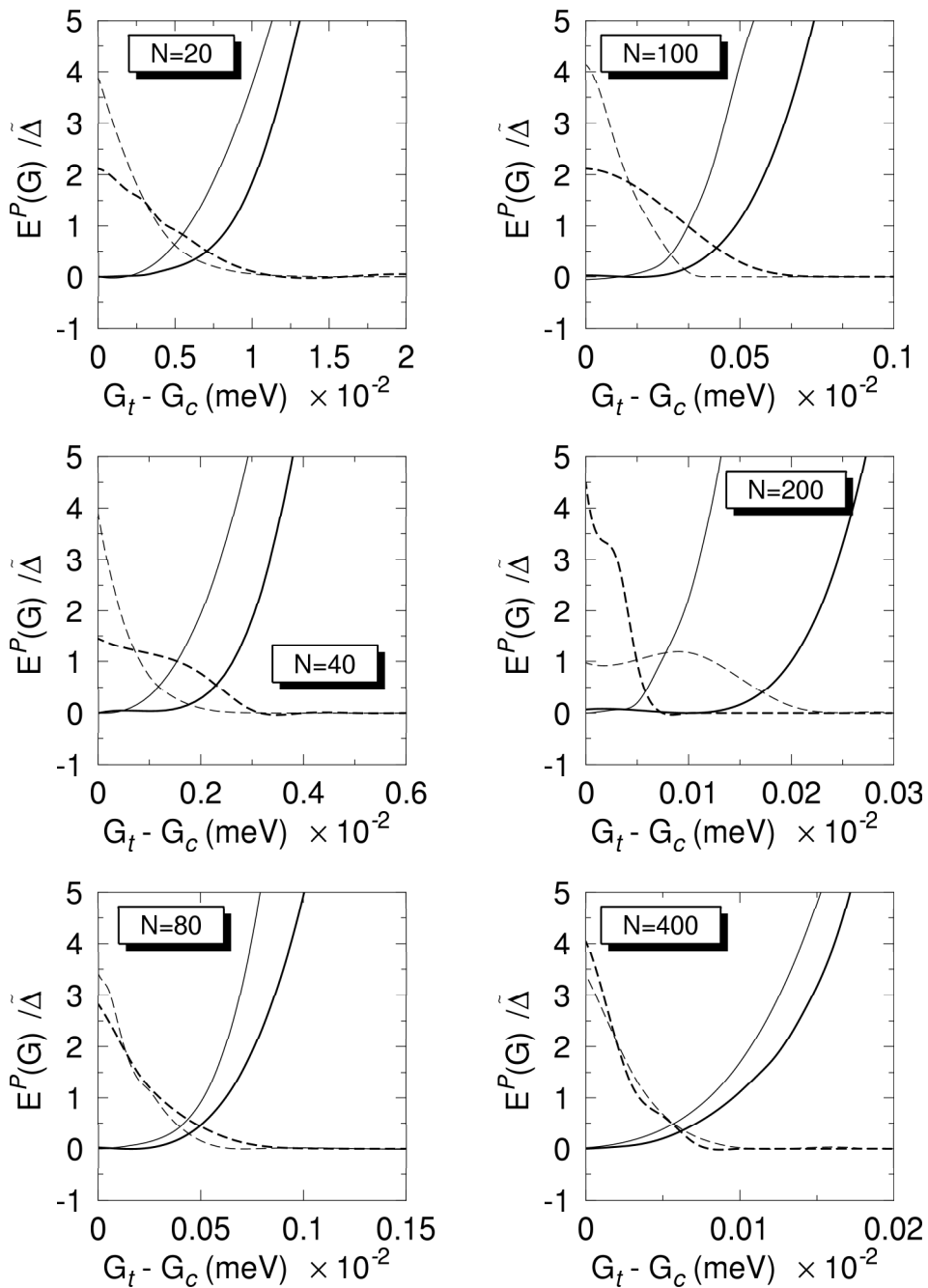


Figura 11.18: Funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  (en la figura  $|g(G)|^2$ ) (líneas discontinúas) y energías proyectadas (líneas continuas) como función de la constante de interacción  $G - G_c$  (ver significado de  $G_c$  en el texto) del estado fundamental de un sistema con un número de partículas par para las aproximaciones MCGPAV (líneas finas) y MCGVAP (líneas gruesas). La escala del eje de las ordenadas hace referencia a las unidades de energía  $E_P(G)/\tilde{\Delta}$ , los mínimos de las curvas de energía se han desplazado al origen de energías. El área que cubre las funciones colectivas es igual para las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

de  $N \approx 200$  es sistema comienza una transición suave hacia el régimen de muchas partículas en el cual es sistema se vuelve extensivo.

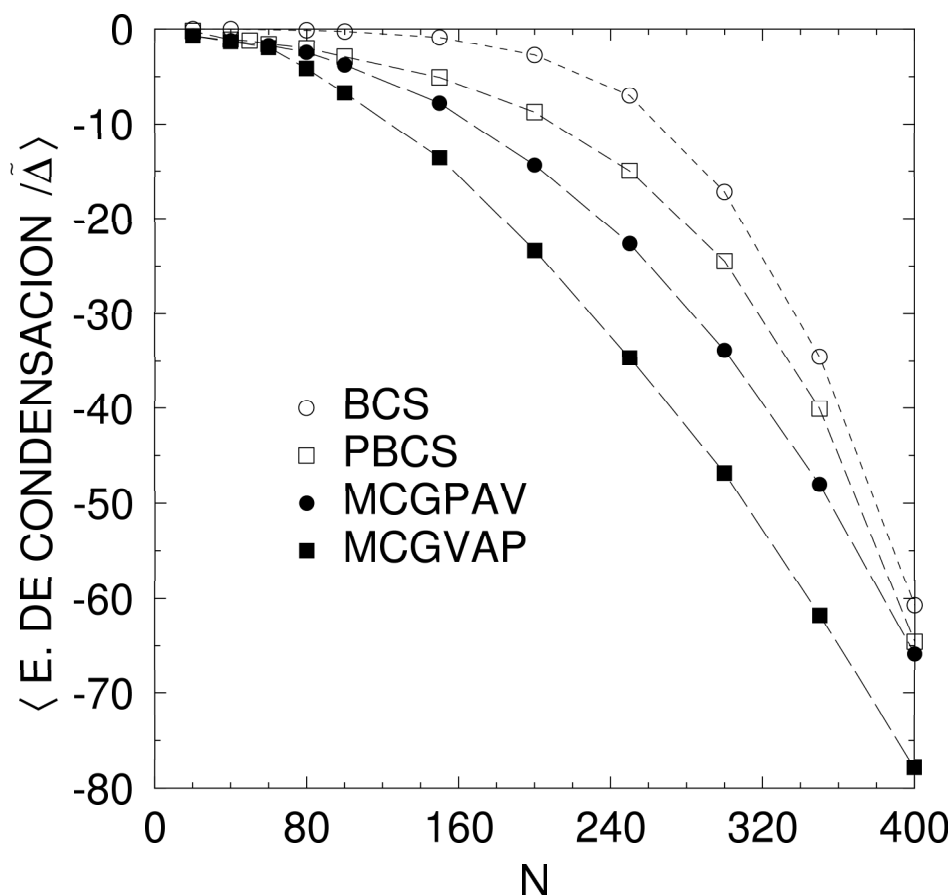


Figura 11.19: Energías de condensación de un sistema con un número de partículas par en unidades de  $\tilde{\Delta}$  para las aproximaciones BCS, PBCS, MCGPAV y MCGVAP con elementos de matriz  $V_{ij}^1$  y  $V_{ij}^2$  aleatorios.

La aproximación PBCS también verifica una transición suave entre los regímenes de pocas y muchas partículas. Las energías en todo momento son siempre menores que las que establece la teoría BCS.

Respecto de los cálculos realizados con el MCG observamos que en la región de pocas partículas está en completo acuerdo con los cálculos proyectados, sin embargo en la región de transición las energías por parte de MCGPAV son menores que las que ofrece la teoría proyectada. Finalmente las dos teorías son casi idénticas para el número de partículas  $N = 400$ . Finalmente la descripción MCGVAP está de acuerdo con las energías que se desprenden de MCGPAV para la región de pocas partículas. Para la región de transición y para la región de muchas partículas sin embargo la aproximación MCGVAP disminuye las energías pero mantiene produce una transición que es asimismo suave.

Obviamente para cada uno de los cálculos realizados dentro de cada una de las aproximaciones se obtienen un conjunto de funciones de onda para cada uno de los número de partículas. Para representarlas hemos escogido simplemente como ejemplo uno de esos cálculos. Se puede verificar

que las conclusiones generales obtenidas para este caso en particular no difieren mucho respecto de otros cálculos.

En la tabla 11.10 mostramos los valores iniciales y finales del valor de la constante  $G$ , de modo que el valor inicial es el valor de  $G_c$  para cada aproximación. Notemos que ahora los rangos de la coordenada  $G$  coinciden prácticamente en ambas aproximaciones. Debido a esto las energías proyectadas correspondientes a MCGVAP quedan por debajo de las correspondientes a MCGPAV.

$N$	20	40	80	100	200	400
$(G_i)_{PAV}$	0.040	0.015	0.009	0.005	0.0020	0.0015
$(G_f)_{PAV}$	0.310	0.096	0.060	0.080	0.0150	0.0058
$(G_i)_{VAP}$	0.040	0.015	0.009	0.005	0.0031	0.0015
$(G_f)_{VAP}$	0.180	0.095	0.042	0.045	0.0130	0.0058

Tabla 11.10: Valores iniciales y finales para la coordenada generadora (medidas en meV) usada en los cálculos. Los subíndices PAV (VAP) corresponden a las aproximaciones MCGPAV (MCGVAP).

En la fig. 11.20 representamos las funciones colectivas correspondientes para los cálculos MCG.

Como podemos ver se obtienen para todos los números de partículas pozos de potencial que tienen una forma parabólica. Los mínimos de las curvas de potencial coinciden en cada una de las aproximaciones para cada número de partículas. Los pozos son más anchos en el caso del MCGVAP, sobre todo en la región de pocas partículas. A partir de  $N = 100$  los pozos de ambas aproximaciones resultan idénticos.

Respecto de las funciones de onda colectivas observamos que representan máximos centrados en los mínimos de los pozos de potencial. La distribución adquiere una forma gaussiana que es más acentuada conforme aumenta el número de partículas, al mismo tiempo que las distribuciones MCGPAV y MCGVAP se hacen iguales.

## 11.5 Conclusiones

Hemos realizado un estudio sistemático de las energías de condensación para un sistema de hamiltonianos basados en la interacción de apareamiento generalizada, los cuales se agrupan en tres familias que poseen solución exacta. Hemos propuesto tres parametrizaciones distintas de los parámetros  $\eta_k$  lo que ha dado lugar a dieciocho hamiltonianos diferentes.

Los resultados que proporciona el método de la coordenada generadora en su versión variacional autoconsistente (MCGVAP) se encuentran en excelente acuerdo con la solución exacta para todo el rango de partículas allí donde hemos podido calcularla. La versión no autoconsistente MCGPAV no es capaz de reproducir las energías de condensación con la precisión que lo hace el método MCGVAP, sin embargo es capaz de describir cualitativamente en todos los casos estudiados el comportamiento adecuado del sistema desde el régimen de pocas a muchas partículas. Especialmente hay que destacar la transición entre ambos regímenes. Al igual que ocurría con el



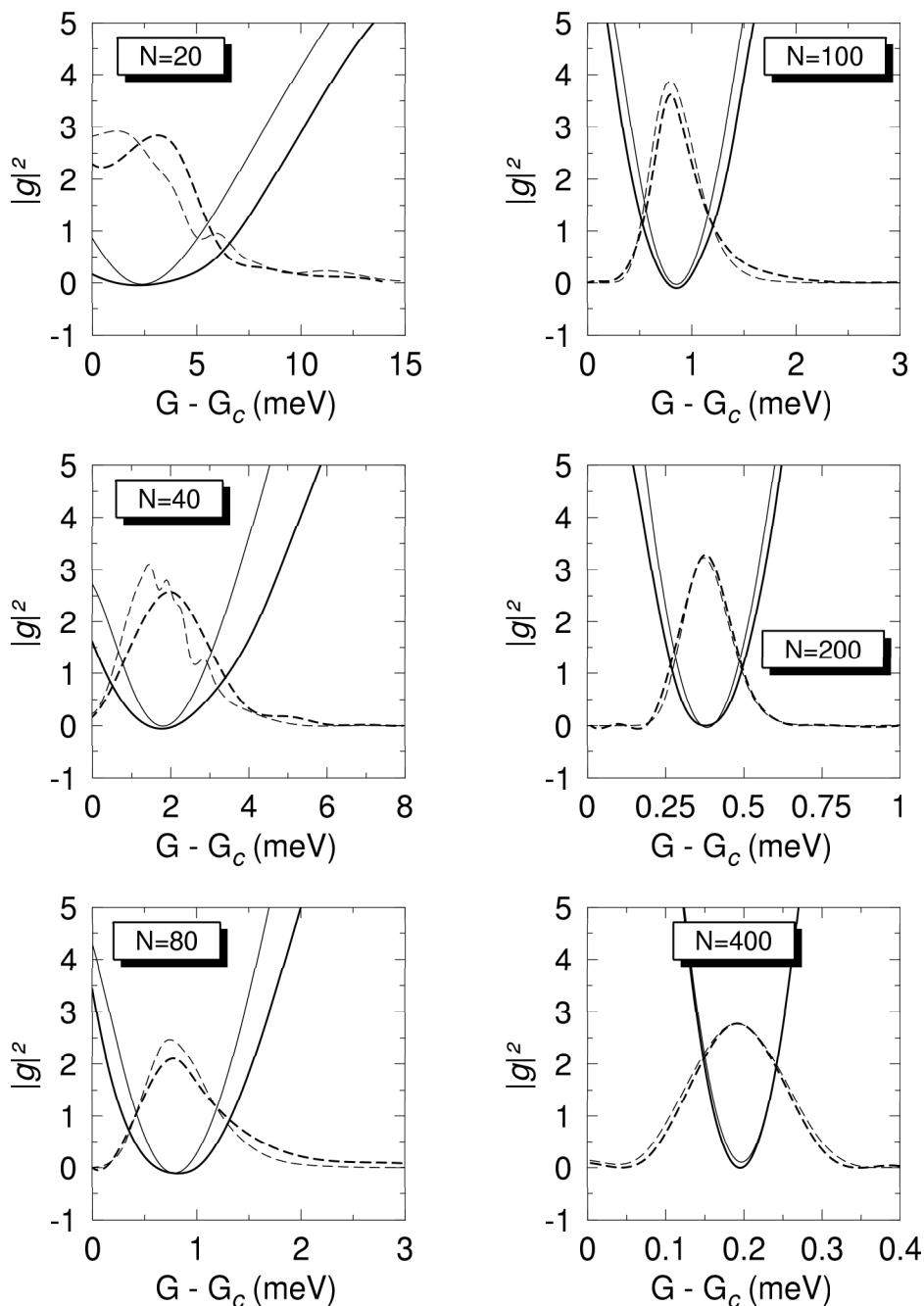


Figura 11.20: Funciones de onda colectivas  $|\mathcal{G}(G)|^2$  (en la figura  $|g(G)|^2$ ) (líneas discontinúas) y energías proyectadas (líneas continuas) como función de la constante de interacción  $G - G_c$  (ver significado de  $G_c$  en el texto) del estado fundamental de un sistema con un número de partículas par para las aproximaciones MCGPAV (líneas finas) y MCGVAP (líneas gruesas). La escala del eje de las ordenadas hace referencia a las unidades de energía  $E_p(G)/\tilde{\Delta}$ , los mínimos de las curvas de energía se han desplazado al origen de energías. El área que cubre las funciones colectivas es igual para las aproximaciones MCGPAV y MCGVAP.

hamiltoniano de apareamiento reducido hemos encontrado situaciones en las cuales dicha transición continúa planteando un problema para el resto de las aproximaciones, como la teoría BCS y

la teoría proyectada PBCS. Las cuales resultan infructuosas para describir la transición y ofrecen conclusiones artificiosas.

Desde este punto de vista ambas versiones del MCG son capaces de tratar correctamente las correlaciones que conducen al sistema a través de la región de transición. Teniendo en cuenta además la facilidad y versatilidad que ofrece desde el punto de vista numérico el MCG (en especial el MCGPAV) el uso del MCG para estos sistemas se convierte en una herramienta muy atractiva.

## CONCLUSIONES GENERALES

Los sistemas superconductores finitos representan claramente un desafío para las teorías actuales en física teórica.

Los granos superconductores son un claro ejemplo de tales sistemas. Las técnicas modernas basadas en la espectroscopía de tuneo individual de electrones en granos metálicos ultrapequeños ha puesto de manifiesto una forma de probar las correlaciones de apareamiento entre electrones, y la forma en la que estas correlaciones se modifican en virtud de las dimensiones del sistema. Esto ha inspirado importantes desarrollos teóricos para comprender cualitativamente como cambian las correlaciones de apareamiento desde el sistema infinito hasta el límite finito con unos pocos electrones.

A lo largo de esta tesis hemos puesto de manifiesto la necesidad de aplicar una teoría que conserve el número de partículas para poder describir tales sistemas. Para ello hemos aplicado dos métodos adaptados de la física nuclear al modelo de apareamiento reducido. El primer método es el que se basa en la proyección del estado BCS (PBCS), el cual está diseñado para recuperar la simetría del número de partículas roto por la teoría BCS. Tratando así al sistema en un conjunto canónico. El segundo método, que forma el cuerpo de esta tesis, está basado en el método de la coordenada generadora (MCG), ampliamente utilizado en las aplicaciones en física nuclear.

Ambas teorías nos permiten el estudio completo de las propiedades más importantes de los granos superconductores. En especial, la transición entre el régimen de pocas partículas y el de muchas. Para ello hemos calculado las energías de condensación, analizado correladores y funciones de onda y discutido los efectos de paridad en el número de electrones centrándonos en cómo cambia el comportamiento de estas cantidades cuando el tamaño del sistema decrece desde un tamaño macroscópico hasta uno mesoscópico, en el cual el espaciado entre niveles es el dominante en la escala de energías.

Hemos demostrado que conforme aumenta el espaciado entre niveles la naturaleza de las correlaciones de apareamiento cambia su carácter, partiendo desde un carácter BCS (acoplamiento fuerte) hasta uno en el que las correlaciones se encuentran deslocalizadas en energía (acoplamiento débil) y por tanto dominadas por fuertes fluctuaciones cuánticas. Hemos demostrado que esta transición entre ambos regímenes es infructuosamente tratada por la teoría PBCS (prediciendo una transición abrupta), la cual es incapaz de tratar correctamente la naturaleza de las correlaciones de apareamiento, subestimando la intensidad de las correlaciones, según se demuestra cuando es

comparada con la solución exacta del modelo, que predice una transición suave. Por contra, ponemos de manifiesto que el MCG está en perfecto acuerdo con la solución exacta, a partir de incluir más correlaciones basadas en la noción de espacio colectivo.

Hemos extendido las aplicaciones del MCG a modelos más generalizados basados en la interacción de apareamiento. Hemos encontrado que el MCG es capaz de reproducir la física de estos modelos tanto cualitativa como cuantitativamente.

---

# V

## APÉNDICES

---



## LÍMITES ANALÍTICOS DEL MODELO BCS

### A.1 $d \rightarrow 0$ y expansión Euler-MacLaurin

Cuando el espaciado entre niveles  $d$  tiende a cero la teoría se reduce a la teoría convencional BCS. Podemos calcular las propiedades de un sistema superconductor al primer orden en  $d$  expandiendo la solución BCS alrededor de  $d = 0$ .

Mientras que en el límite termodinámico ( $d = 0$ ) el desplazamiento  $-g v_j^2$  en las energías de partícula independiente  $\xi_j$  carece de importancia, en los granos superconductores este término influye en el comportamiento del espaciado cerca de la superficie de Fermi. En lo que sigue despreciaremos la dependencia con  $v_j^2$  usando  $\xi_j = \epsilon_j - \mu - g \theta(-(\epsilon_j - \mu))$ , en consecuencia esperamos acuerdo con los resultados numéricos para  $d \ll \tilde{\Delta}$  y  $s \neq 0$ . Dentro de esta aproximación para  $\xi_j$ ,  $\mu$  queda situado a mitad de camino entre el nivel doblemente ocupado superior y el nivel completamente vacío más bajo para  $s = 0$ :  $\mu = \epsilon_0 - d(\delta_{p,0} + \lambda)/2$ .

Notemos que  $\mu$  no queda exactamente situado sobre uno de los niveles en el caso impar como uno podría esperar en un principio, sino que queda situado de nuevo a medio camino entre el último nivel ocupado doblemente y el primer nivel completamente vacío.

Podemos calcular el parámetro de apareamiento  $\Delta_s(d)$  en el límite de  $d$  pequeño calculando los primeros términos de su serie de Taylor:

$$\Delta_s(d) \cong \left( 1 + d\partial_d + \frac{d^2}{2}\partial_d^2 \right) \Delta_s(0). \quad (\text{A.1})$$

Ahora es suficiente resolver la ecuación del gap, así como su primera y segunda derivadas con respecto a  $d$ , para  $d = 0$ . Esto puede realizarse reescribiendo la ecuación del gap usando la fórmula de suma de Euler-MacLaurin,

$$\frac{1}{\lambda} = s \sum_{j=j_0}^{j_1} f(jd) \cong \int_{j_0d}^{j_1d} d\xi f(\xi) + \frac{d}{2} [f(j_0d) + f(j_1d)] + \frac{d^2}{12} [f'(j_0d) + f'(j_1d)], \quad (\text{A.2})$$

donde  $f(jd) = [(jd)^2 + \Delta_s^2]^{-1/2}$ ,  $j_0 = s + (1 + \lambda)/2$  y  $j_1 = \omega_D/d$ . La dependencia con el espín  $s$  ha sido absorbida en el límite inferior  $j_0$  de la suma. La rama negativa de la suma es idéntica a la positiva en virtud de la simetría antes comentada de la posición del valor de  $\mu$ . En consecuencia es

suficiente calcular la parte positiva y multiplicarla por dos. Escribiendo  $d = 0$  en la ecuación (A.2) se llega a la conocida ecuación del gap de la teoría BCS, cuya solución es  $\Delta_s(0) = \tilde{\Delta}$ . La primera y segunda derivada total de la expresión (A.2) son  $\partial_d \Delta_s(d=0) = -s$  y  $\partial_d^2 \Delta_s(d=0) = -s^2/\tilde{\Delta}$ , de modo que el resultado final para (A.1) es

$$\Delta_s(d) \cong \tilde{\Delta} - (s + \lambda/2)d - \frac{(s + \lambda/2)^2 d^2}{2\tilde{\Delta}}. \quad (\text{A.3})$$

Calculemos ahora la energía variacional  $E_s^{BCS}$  evaluandola hasta el primer orden en  $d$ , cuyas sumas son evaluadas de nuevo usando la fórmula de Euler-MacLaurin. Como estamos interesados en el efecto de las correlaciones de pairing restaremos la energía correspondiente al estado no correlacionado del mar de Fermi  $|p\rangle_0$ :

$$\text{par:} \quad E_s^{BCS} - E_0^0 \cong -\frac{\tilde{\Delta}^2}{2d} + \left(1 + \frac{\pi}{4}\right)\lambda\tilde{\Delta} + 2s\tilde{\Delta} - \left(s^2 - \frac{1}{12} + \frac{\pi+6}{4}\lambda s\right)d; \quad (\text{A.4})$$

$$\text{impar:} \quad E_s^{BCS} - E_{\frac{1}{2}}^0 \cong -\frac{\tilde{\Delta}^2}{2d} + \frac{\pi}{4}\lambda\tilde{\Delta} + 2s\tilde{\Delta} - \left(s^2 + \frac{1}{6} + \frac{\pi+6}{4}\lambda s + \frac{\lambda}{2}\right)d. \quad (\text{A.5})$$

El término que va como  $d^{-1}$  es la energía de correlación en el límite termodinámico, que aparece débilmente renormalizada por el término intensivo  $(1 + \frac{\pi}{4})\lambda\tilde{\Delta}$ . El término  $2s\tilde{\Delta}$  es la energía de excitación para  $2s$  cuasi-partículas. El término con  $d^1$  es la corrección al primer orden para el espaciado de niveles discreto.

## A.2 $d$ cerca de $d_c$ y la expansión para $\Delta$ pequeño

El otro límite tratable analíticamente es  $d \gg \Delta_s$ , válido siempre que los valores de  $d$  estén cercanos al espaciado crítico  $d_s^{BCS}$  donde  $\Delta_s$  se anula.

Primero, derivamos una expresión para el valor crítico  $d_s^{BCS}$  resolviendo la ecuación del gap con  $\Delta_s$  nulo para  $d$ :

$$\frac{1}{\lambda} = \sum_{j=j_0}^{\omega_D/d_s^{BCS}} \frac{1}{j} = \Psi(\omega_D/d_s^{BCS} + 1) - \Psi(j_0). \quad (\text{A.6})$$

Donde  $\Psi(x)$  denota la función Digamma  $\Psi(x) \equiv \Gamma'(x)/\Gamma(x)$  y  $j_0$  es igual a  $s + \frac{1+\lambda}{2}$  de nuevo. Recordando que  $\lambda = 1/\log\left(\frac{2\omega_D}{\tilde{\Delta}}\right)$  y  $\exp(\Psi(x)) \approx x - \frac{1}{2}$  para  $x$  grandes, esta ecuación se reduce a

$$\log\left(\frac{2d_s^{BCS}}{\tilde{\Delta}}\right) = -\Psi\left(s + \frac{1+\lambda}{2}\right) \quad (\text{A.7})$$

$$d_s^{BCS} = \frac{\tilde{\Delta}}{2} \exp\left(-\Psi\left(s + \frac{1+\lambda}{2}\right)\right). \quad (\text{A.8})$$

Para  $s \geq 1$  puede ser simplificado a



$$d_s^{BCS} \cong \frac{\tilde{\Delta}}{2s + \lambda}. \quad (\text{A.9})$$

Cerca de  $d_s^{BCS}$  el parámetro de pairing se anula como

$$\Delta_s \cong \tilde{\Delta} \sqrt{1 - \frac{d}{d_s^{BCS}}} \quad \text{para } d \gg \Delta_s \text{ y } s > 0, \quad (\text{A.10})$$

como mostramos a continuación. Como para los estados fundamentales de espín  $s$  con parámetro de apareamiento nulo los pares de electrones y de huecos están distribuidos simétricamente alrededor de la superficie de Fermi, de forma que  $\mu = \epsilon_0 - d(\delta_{p,0} + \lambda/2)$ . Volvamos a la ecuación del gap. La dependencia con el espín ha sido absorbida en  $j_0$ . La rama positiva y negativa de la suma restringida son idénticas (debido a la simetría del valor de  $\mu$ ) con  $|\xi|$  recorriendo desde  $d(s + \frac{1+\lambda}{2}) = dj_0$  hasta  $\omega_D$ . En consecuencia es suficiente calcular la rama positiva y multiplicarla por dos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= \sum_{j=j_0}^{\omega_D/d} (j^2 + \Delta_s^2/d^2)^{-1/2} \\ &\cong \sum_{j=s+(1+\lambda)/2}^{\omega_D/d} \left( \frac{1}{j} - \frac{\Delta_s^2}{2d^2 j^3} \right) \\ \sum_{j=s+(1+\lambda)/2}^{\omega_D/d_s^{BCS}} \frac{1}{j} &\cong \sum_{j=s+(1+\lambda)/2}^{\omega_D/d} \left( \frac{1}{j} - \frac{\Delta_s^2}{2d^2 j^3} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Para obtener la ecuación (A.11), la raíz cuadrada es expandida usando  $\Delta_s \ll d$ . Las sumas restantes pueden ser expresadas mediante la función Polygamma  $\Psi^{(n)}$  usando la identidad

$$\sum_{k=1}^n \frac{1}{k^m} = \zeta(m) - (-1)^m \frac{\Psi^{m-1}(n+1)}{(m-1)!}. \quad (\text{A.12})$$

Reemplazando las sumas por la función Polygamma y juntando términos se llega a

$$\Psi\left(\frac{\omega_D}{d_s^{BCS}} + 1\right) - \Psi\left(\frac{\omega_D}{d} + 1\right) = -\frac{\Delta_s^2}{4d^2} \left[ \Psi''\left(\frac{\omega_D}{d} + 1\right) - \Psi''\left(s + \frac{1+\lambda}{2}\right) \right]. \quad (\text{A.13})$$

Asumamos ahora que  $d$  está cercano a  $d_s^{BCS}$ :  $d = d_s^{BCS} - \delta d$  y  $\delta d \ll d_s^{BCS}$ . Expandimos el miembro izquierdo en  $\delta d$  y usamos el comportamiento asintótico de  $\Psi'$  (sobre el miembro izquierdo) y  $\Psi''$  (sobre el miembro derecho) para argumentos  $\omega_D/d$  grandes. Además el término  $\Psi''(s + \frac{1}{2})$  es aproximado por su forma asintótica  $-s^2$ :

$$\frac{\delta d}{d_s^{BCS}} = -\frac{\Delta_s^2}{4d^2} \Psi'' \left( s + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{A.14})$$

$$\Delta_s^2 = 4d^2 s^2 \frac{d_s^{BCS} - d}{d_s^{BCS}} \quad (\text{A.15})$$

$$\Delta_s = \tilde{\Delta} \sqrt{1 - \frac{d}{d_s^{BCS}}}. \quad (\text{A.16})$$

Los últimos dos pasos fueron realizados recordando que  $4d^2 s^2 = 4(d_s^{BCS})^2 s^2 \cong \tilde{\Delta}^2$  para  $s \neq 0$ .

Aunque (A.9) fue derivada para  $d$  cerca de  $d_s^{BCS}$ , su rango de validez es sorprendentemente grande. La expansión para  $d$  pequeño en potencias de  $d/\tilde{\Delta}$  está de acuerdo al menos hasta el segundo orden con (A.3), y para  $s \geq 1$  reproduce excelentemente los resultados numéricos para  $\Delta_s(d)$  para todo  $d$ .

Para  $s = 0$  la expansión asintótica de  $\Psi''$  explota. En consecuencia directamente de (A.14) deducimos

$$\Delta_0 \cong \sqrt{\frac{4d^2 d_s^{BCS} - d}{9.4 d_s^{BCS}}}, \quad (\text{A.17})$$

donde hemos usado  $\Psi'' \left( \frac{1+\lambda}{2} \right) \cong -9.4$ . Este resultado da buen acuerdo con los resultados numéricos cerca de  $d_{s=0}^{BCS}$ , pero obviamente tiene un mal comportamiento en el límite  $d \rightarrow 0$ .

## DETALLES DEL MÉTODO PBCS

En este apéndice desarrollamos parte de la formulación del método PBCS, por ejemplo la formulación de los sistemas con un número de partículas impares, así como aspectos de la solución numérica de las ecuaciones variacionales.

### B.1 Evaluación de los valores esperados

En la presente sección centramos la atención en el Hamiltoniano reducido de apareamiento,

$$H = \sum_k \epsilon_k n_k - g \sum_{k,k'} A_k^\dagger A_{k'} \quad (\text{B.1})$$

La función de onda proyectada a buen número de partículas  $N$ , siendo  $n_0$  el número de pares, como fue explicado en el capítulo del método proyectado es,

$$|BCS\rangle_N = C \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i\phi n_0} \prod_{k=1}^{\Omega} (u_k + e^{i\phi} v_k A_k^\dagger) |-\rangle. \quad (\text{B.2})$$

Con el cambio de variable  $z = e^{i\phi}$  la función de onda pasa a ser

$$|BCS\rangle_N = -iC \oint dz z^{-n_0-1} \prod_{k=1}^{\Omega} (u_k + z v_k A_k^\dagger) |-\rangle \quad (\text{B.3})$$

con el cambio la integral original en la variable  $\phi$  ha sido reemplazada por una integral de contorno alrededor del origen en el plano complejo  $z$ . Trabajaremos con esta expresión de la función de onda.

La función de onda complejo conjugada es

$$\langle BCS| = iC^* \oint dz^* (z^*)^{-n_0-1} \langle -| \prod_{k=1}^{\Omega} (u_k^* + z^* v_k^* A_k) \quad (\text{B.4})$$

Empecemos por calcular la constante  $C$  para que la función de onda esté normalizada  $\langle BCS|BCS \rangle_N = 1$ ,

$$\begin{aligned}
 \langle BCS|BCS \rangle_N &= C^2 \oint dz' dz^* (z')^{-n_0-1} (z^*)^{-n_0-1} \prod_{k=1}^{\Omega} (u_k^2 + z' z^* v_k^2) \\
 &= -2\pi i C^2 \oint dz z^{-n_0-1} \prod_{k=1}^{\Omega} (u_k^2 + z v_k^2) \\
 &\equiv -(2\pi i)^2 C^2 R_0^0
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

De donde  $C = \left[ 2\pi \sqrt{R_0^0} \right]^{-1}$ . La última expresión de (B.5) contiene a la integral de residuo  $R_0^0$ .

El principio variacional nos fuerza a elegir las amplitudes  $u_k, v_k$  de tal forma que la energía  $E = \langle BCS|H|BCS \rangle_N$  sea mínima. Calculemos en detalle dicho valor esperado.

El valor esperado  $\langle BCS|H|BCS \rangle_N$  consiste en una suma de diferentes términos:

a)  $\langle BCS|c_k^\dagger c_k|BCS \rangle_N$ . Este término representa la parte cinética del Hamiltoniano.

$$\begin{aligned}
 \langle BCS|c_k^\dagger c_k|BCS \rangle_N &= C^2 \oint dz_1 dz_2^* z_1^{-n_0-1} (z_2^*)^{-n_0-1} \\
 &\quad \langle - | \prod_j (u_j^* + z_2^* v_j^* c_{j-} c_{j+}) c_k^\dagger c_k \prod_j (u_j + z_1 v_j c_{j+}^\dagger c_{j-}^\dagger) | - \rangle \\
 &= C^2 \oint dz_1 dz_2^* z_1^{-n_0-1} (z_2^*)^{-n_0-1} \prod_{j \neq k} (u_j^2 + z_1 z_2^* v_j^2) v_k^2 z_1 z_2^* \\
 &= -2\pi i C^2 \oint dz z^{-(n_0-1)-1} v_k^2 \prod_{j \neq k} (u_j^2 + z v_j^2) \\
 &= v_k^2 \frac{R_1^k}{R_0^0}
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

b)  $\langle BCS|c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+}|BCS \rangle_N$ . Esta es la parte correspondiente a la interacción entre pares de partículas. Para calcularlo es necesario considerar dos términos distintos:

b1)  $k = k'$ ,  $\langle BCS|c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k-} c_{k+}|BCS \rangle_N$ .

$$\begin{aligned}
 \langle BCS|c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+}|BCS \rangle_N &= -2\pi i C^2 \oint dz z^{-n_0-1} \prod_{j \neq k} (u_j^2 + z v_j^2) z v_k^2 \\
 &= v_k^2 \frac{R_1^k}{R_0^0}
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

b2)  $k \neq k'$ ,  $\langle BCS|c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+}|BCS \rangle_N$ .

$$\begin{aligned}
 \langle BCS | c_{k_+}^\dagger c_{k_-}^\dagger c_{k'_-} c_{k'_+} | BCS \rangle_N &= -C^2 \oint dz_1 dz_2 z_1^{-n_0-1} z_2^{-n_0-1} \\
 &\quad \langle - | \prod_j (u_j + z_1 v_j c_{j-} c_{j+}) c_{k_+}^\dagger c_{k_-}^\dagger c_{k'_-} c_{k'_+} \prod_j (u_j + z_2 v_j c_{j+}^\dagger c_{j-}^\dagger) | - \rangle \\
 &= -2\pi i C^2 \oint dz z^{-(n_0-1)-1} \prod_{j \neq k, k'} (u_j^2 + z v_j^2) u_k v_k u_{k'} v_{k'} \\
 &= u_k v_k u_{k'} v_{k'} \frac{R_1^{kk'}}{R_0^0}. \tag{B.8}
 \end{aligned}$$

Finalmente para la expresión de la energía del estado fundamental tenemos,

$$E_N = \langle BCS | H | BCS \rangle_N = 2 \sum_j \left( \epsilon_j - \frac{g}{2} \right) v_j^2 \frac{R_1^j}{R_0^0} - g \sum_{jk} u_j v_j u_k v_k \frac{R_1^{jk}}{R_0^0}. \tag{B.9}$$

## B.2 Variación de las integrales de Residuo

En esta sección analizamos la variación de las integrales de residuo. Habiendo definido  $v_j$  como el parámetro variacional tenemos que expresar las variaciones de  $v_j$  por derivadas parciales con respecto a las variables dependientes  $v_j$  y  $u_j$ :

$$\frac{\delta}{\delta v_j} = \frac{\delta}{\delta v_j} - \frac{v_j}{u_j} \frac{\partial}{\partial u_j}. \tag{B.10}$$

Aunque por un lado la energía proyectada (B.9) depende explícitamente de las cantidades  $u_j, v_j$  por otro lado depende implícitamente a través de las integrales de residuo. En consecuencia necesitamos conocer la variación de las integrales de residuo con respecto a  $v_j$  y  $u_j$ :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial v_j} R_n^{j_1 \dots j_N} &= \frac{\partial}{\partial v_j} \frac{1}{2\pi i} \oint dz z^{-(n_0-1)-1} \prod_{k \neq j_1 \dots j_N} (u_k^2 + z v_k^2) \\
 &= \frac{1}{2\pi i} \oint dz z^{-(n_0-1)-1} 2 v_j z \prod_{k \neq j_1 \dots j_N, j} (u_k^2 + z v_k^2) \\
 &= 2 v_j R_{n+1}^{j, j_1 \dots j_N}, \tag{B.11}
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial u_j} R_n^{j_1 \dots j_N} = 2 u_j R_n^{j, j_1 \dots j_N}. \tag{B.12}$$

Para la variación con respecto a  $v_j$  ambos resultados juntos dan

$$\frac{\delta}{\delta v_j} R_n^{j_1 \dots j_N} = 2 v_j \left( R_{n+1}^{j, j_1 \dots j_N} - R_n^{j, j_1 \dots j_N} \right). \tag{B.13}$$

Como las integrales de residuo aparecen como cocientes de la forma  $R_n^{j_1, \dots, j_N} / R_0^0$  es razonable encontrar la variaciones de esos cocientes:

$$\frac{\delta R_1^k}{\delta v_j R_0^0} = 2 v_j \left( \frac{R_2^{jk} - R_1^{jk}}{R_0^0} - \frac{R_1^k R_1^j - R_0^j}{R_0^0 R_0^0} \right), \quad (\text{B.14})$$

$$\frac{\delta R_1^{kl}}{\delta v_j R_0^0} = 2 v_j \left( \frac{R_2^{jkl} - R_1^{jkl}}{R_0^0} - \frac{R_1^{kl} R_1^j - R_0^j}{R_0^0 R_0^0} \right). \quad (\text{B.15})$$

### B.3 Las ecuaciones variacionales.

Calculemos la variación del valor esperado de la energía  $E_N$  con respecto a  $v_j$ ,  $\frac{\delta E_N}{\delta v_j}$ . El resultado de la variación dará lugar a las ecuaciones variacionales, las cuales una vez resueltas determinan las amplitudes  $v_j$  que minimizan la energía del estado fundamental.

$$\begin{aligned} \frac{\delta E_N}{\delta v_j} &= 4v_j \left( \epsilon_j - \frac{g}{2} \right) \frac{R_1^j}{R_0^0} + \\ &+ 4 \sum_k \left( \epsilon_k - \frac{g}{2} \right) v_k^2 v_j \left( \frac{R_2^{jk} - R_1^{jk}}{R_0^0} - \frac{R_1^k R_1^j - R_0^j}{R_0^0 R_0^0} \right) - \\ &- 2g \sum_k u_k v_k \left( u_j - \frac{v_j^2}{u_j} \right) \frac{R_1^{jk}}{R_0^0} - \\ &- 2g \sum_{kl} u_k v_k u_l v_l v_j \left( \frac{R_2^{jkl} - R_1^{jkl}}{R_0^0} - \frac{R_1^{kl} R_1^j - R_0^j}{R_0^0 R_0^0} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

$$\begin{aligned} &= 4v_j \left\{ \left( \epsilon_j - \frac{g}{2} \right) \frac{R_1^j}{R_0^0} + \right. \\ &+ \sum_k \left( \epsilon_k - \frac{g}{2} \right) v_k^2 \left( \frac{R_2^{jk} - R_1^{jk}}{R_0^0} - \frac{R_1^k R_1^j - R_0^j}{R_0^0 R_0^0} \right) - \\ &- \frac{g}{2} \sum_k u_k v_k \frac{R_1^{jk}}{R_0^0} \frac{u_j^2 - v_j^2}{u_j v_j} - \\ &\left. - \frac{g}{2} \sum_{kl} u_k v_k u_l v_l \left( \frac{R_2^{jkl} - R_1^{jkl}}{R_0^0} - \frac{R_1^{kl} R_1^j - R_0^j}{R_0^0 R_0^0} \right) \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

$$\equiv 4v_j \left\{ (\hat{\epsilon}_j + \Lambda_j) - \Delta_j \frac{u_j^2 - v_j^2}{u_j v_j} \right\} = 0. \quad (\text{B.18})$$

En donde en las expresiones anteriores se han introducido las definiciones:

$$\hat{\epsilon}_j = \left( \epsilon_j - \frac{g}{2} \right) \frac{R_1^j}{R_0^0}, \quad (\text{B.19})$$

$$\Delta_j = \frac{g}{2} \sum_k u_k v_k \frac{R_1^{jk}}{R_0^0}, \quad (\text{B.20})$$

$$\begin{aligned} \Lambda_j = & \sum_k \left( \epsilon_j - \frac{g}{2} \right) v_k^2 \left( \frac{R_2^{jk} - R_1^{jk}}{R_0^0} - \frac{R_1^k R_1^j - R_0^j}{R_0^0 R_0^0} \right) - \\ & - \frac{g}{2} \sum_{kl} u_k v_k u_l v_l \left( \frac{R_2^{jkl} - R_1^{jkl}}{R_0^0} - \frac{R_1^{kl} R_1^j - R_0^j}{R_0^0 R_0^0} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Con estas definiciones las ecuaciones variacionales son:

$$(\hat{\epsilon}_j + \Lambda_j) u_j v_j = \Delta_j (u_j^2 - v_j^2). \quad (\text{B.22})$$

La expresión anterior representa una ecuación para  $v_j$  (y  $u_j$ ) para cada nivel  $j$ . Aunque no queda de manifiesto explícitamente en la forma escrita, las ecuaciones variacionales acoplan las ocupaciones de los niveles de monopartícula  $v_k$  a los restantes niveles  $v_{k'}$ .

## B.4 Sistema con un número de partículas impar

El método de la proyección a buen número de partículas presentado en la parte de teoría puede extenderse a un número de partículas impar. A continuación describimos de que forma las fórmulas presentadas anteriormente quedan modificadas.

Un sistema con un número impar de partículas está descrito por el estado:

$$|BCS\rangle_{N+1}^l = \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i\phi n_0} c_l^\dagger \prod_{k \neq l} (u_k + e^{i\phi} v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \quad (\text{B.23})$$

siendo  $N$  un número entero y  $l$  el estado ocupado por una única partícula (estado bloqueado).

Las integrales de residuos quedan ahora de la forma siguiente:

$$R_n^{j_1, \dots, j_M, l} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i(n_0 - n)\phi} \prod_{k \neq j_1, \dots, j_M, l} (u_k^2 + e^{i\phi} v_k^2). \quad (\text{B.24})$$

Todos los valores esperado pueden calcularse con B.23. En virtud de la estructura que posee este estado todas las expresiones siguientes pueden obtenerse prácticamente sin necesidad de realizar ningún cálculo. Así por ejemplo para la energía se obtiene:

$$E_{N+1}^l = 2 \sum_{j \neq l} \left( \epsilon_j - \frac{G}{2} \right) v_j^2 \frac{R_1^{j,l}}{R_0^l} - G \sum_{jk \neq l} u_j v_j u_k v_k \frac{R_1^{jk,l}}{R_0^l} + \epsilon_l \quad (\text{B.25})$$

Como se observa la fórmula de la energía para el sistema impar se obtiene de la correspondiente al sistema par eliminando de las sumas y productos el estado  $l$  y añadiendo la energía que corresponde a la partícula desapareada. Obviamente en función del estado  $l$  bloqueado se obtendrán las diferentes energías de los estados excitados.

El resto de fórmulas pueden derivarse con el procedimiento que hemos subrayado anteriormente. En todas las sumas y productos debe eliminarse el estado bloqueado.

## B.5 Solución numérica de las ecuaciones variacionales

El conjunto de ecuaciones variacionales (5.20) tiene que ser resuelto numéricamente. Como se trata de un conjunto de ecuaciones no lineales ha de ser resuelto mediante un procedimiento iterativo.

Para que dicho método sea eficiente es necesario la introducción de un nuevo conjunto de variables  $\chi_k$ , las cuales están relacionadas con las variables originales  $(u_k, v_k)$  a través de las siguientes igualdades,

$$u_k^2 = \frac{\chi_k}{1 + \chi_k}, \quad v_k^2 = \frac{1}{1 + \chi_k}. \quad (\text{B.26})$$

Notemos que la normalización  $u_k^2 + v_k^2 = 1$  es tenida en cuenta en la definición anterior. Las ecuaciones variacionales (5.20) en términos de las variables  $\chi_k$  quedan de la siguiente forma

$$(\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k) \chi_k^{1/2} - \Delta_k (\chi_k - 1) = 0 \quad (\text{B.27})$$

Con la transformación adicional

$$\chi_k = e^{\theta_k} \quad (\text{B.28})$$

es posible aislar la nueva variable  $\theta_k$  en términos de los campos  $\hat{\epsilon}_k$ ,  $\Lambda_k$  y  $\Delta_k$

$$\theta_k = 2 \sinh^{-1} \left( \frac{\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k}{2\Delta_k} \right) \quad (\text{B.29})$$

La ventaja de la transformación (B.28) queda reflejada en la última expresión (B.29). El lado derecho de la ecuación *no depende explícitamente* de  $\theta_k$ , pues los campos  $\hat{\epsilon}_k$ ,  $\Lambda_k$  y  $\Delta_k$  son independientes de  $\theta_k$ . Este hecho es fundamental para resolver satisfactoriamente el conjunto de ecuaciones (B.29) por iteración numérica. La mejor forma de resolverlas es comenzar con la solución BCS, hasta que la convergencia en el valor de la energía, fijada una tolerancia se alcance. Toda la implementación numérica debe estar basada en las variables  $\theta_k$ .



## B.6 Cálculo de las integrales de Residuo.

Las ecuaciones variacionales (5.20) contienen a las integrales de residuo  $R_n^{j_1, \dots, j_n}$ , de modo que es necesario poder calcular eficazmente las mismas. Como las integrales deben ser calculadas para diferentes conjuntos de variables  $\theta_k$ , la eficiencia en la solución numérica de (B.29) requiere el cálculo de las integrales de residuo de forma rápida y precisa. Para este fin hemos usado el método de la transformada rápida de Fourier, cuya implementación está explicada con detalle en el apéndice (C).

Por otro lado, desde el punto de vista computacional, es deseable poder calcular el menor número posible de integrales, para minimizar así el tiempo necesario de cálculo. Dos identidades pueden ser explotadas para este propósito. La primera de ellas fue encontrada por Dietrich *et al* [DMP64]. Es fácil demostrar que las integrales de residuo satisfacen la siguiente relación de recursión:

$$R_m^{j_1, \dots, j_M} = u_k^2 R_m^{j_1, \dots, j_M, k} + v_k^2 R_{m+1}^{j_1, \dots, j_M, k} \quad (\text{B.30})$$

El cálculo de dos integrales de residuo permite calcular una tercera diferente. Esto reduce el cálculo total de integraciones a uno sobre tres. La segunda identidad, mucho más potente, fue encontrada por Ma y Rasmussen [MR77],

$$R_m^{j_1, \dots, j_M} = \delta_{m, M} R_0^0 \prod_{j=j_1, \dots, j_M} \frac{1}{v_j^2} + (-)^m \sum_{j_1, \dots, j_M} v_j^{2(M-m-1)} u_j^{2m} \left( \prod_{k=j_1, \dots, j_M (\neq j)} \frac{1}{v_j^2 - v_k^2} \right) R_0^j \quad (\text{B.31})$$

Esta fórmula permite calcular todas las integrales de residuo si las integrales  $R_0^0$  y  $R_0^j$  son conocidas, reduciendo así el número total de integrales a  $N + 1$  dado un conjunto  $\theta_k$ . Para propósitos numéricos la fórmula (B.31) no es recomendable. Una implementación directa de tal fórmula resulta en un código inestable, debido a que muchos términos se cancelan entre sí. Además sólo necesitamos calcular tres términos,  $R_1^{jk}$ ,  $R_2^{jkl} - R_1^{jkl}$  y  $R_2^{jk} - R_1^{jk}$ . Si  $R_0^0$  y  $R_0^j$  son conocidas,  $R_1^j$  puede ser obtenida por la relación de recursión de Dietrich (B.30). Consideremos primero  $R_m^{jk}$  con  $m = 1$  o  $m = 2$ . La fórmula de Ma (B.31) se reduce a

$$R_m^{jk} = \delta_{m, 2} \frac{R_0^0}{v_j^2 v_k^2} + (-)^m \frac{\zeta_j^m v_j^2 R_0^j - \zeta_k^m v_k^2 R_0^k}{v_j^2 - v_k^2} \quad (\text{B.32})$$

donde hemos usado la identidad  $\zeta_j = \frac{1}{v_j^2} - 1$ . La diferencia  $R_2^{jk} - R_1^{jk}$  se puede escribir de una forma sencilla,

$$R_2^{jk} - R_1^{jk} = \frac{R_0^0}{v_j^2 v_k^2} - \frac{R_0^j (v_j^2 - 1)}{v_j^2 (v_j^2 - v_k^2)} + \frac{R_0^k (v_k^2 - 1)}{v_k^2 (v_j^2 - v_k^2)}. \quad (\text{B.33})$$

Para la diferencia  $R_2^{jkl} - R_1^{jkl}$  se obtiene,

$$R_2^{jkl} - R_1^{jkl} = \frac{(u_j^4 + u_j^2 v_j^2) R_0^j}{(v_j^2 - v_k^2)(v_j^2 - v_l^2)} + \frac{(u_k^4 + u_k^2 v_k^2) R_0^k}{(v_k^2 - v_j^2)(v_k^2 - v_l^2)} + \quad (\text{B.34})$$

$$+ \frac{(u_l^4 + u_l^2 v_l^2) R_0^l}{(v_l^2 - v_j^2)(v_l^2 - v_k^2)}. \quad (\text{B.35})$$

Como los índices de las integrales de residuo pueden ser permutados,  $R_2^{jkl} - R_1^{jkl}$  pueden ser expresadas para todas las posibles combinaciones de  $v_j, v_k, v_l$  por las ecuaciones de arriba.

## Apéndice C

# CALCULANDO INTEGRALES DE RESIDUO USANDO LA TRANSFORMACIÓN RÁPIDA DE FOURIER (FFT)

En este apéndice se explica con detalle el método que hemos seguido para realizar el cálculo de las integrales de Residuo,

$$R_n^{j_1, \dots, j_M} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i(n_0-n)\phi} \prod_{k \neq j_1, \dots, j_M} (u_k^2 + e^{i\phi} v_k^2). \quad (\text{C.1})$$

Estas integrales pueden expresarse analíticamente mediante las siguientes sumas [TM],

$$R_n^{j_1, \dots, j_M} = \sum_{p_1 <} \sum_{p_2 <} \dots \sum_{< p_{n_0-n}} g_{p_1}^2 \dots g_{p_{n_0-n}}^2, \quad (\text{C.2})$$

donde

$$g_p^2 = \frac{v_p^2}{u_p^2}, \quad p_i \neq j_1, \dots, j_M \quad (i = 1, \dots, n_0 - n).$$

Sin embargo la expresión (C.2) se vuelve impracticable debido a la existencia de muchas sumas anidadas, las cuales necesitan un tiempo grande de cálculo incluso para unos pocos pares. En consecuencia, es necesario acudir a las técnicas de integración numérica para evaluar las integrales de Residuo. A pesar de que se trate de una aproximación, las integrales deben ser calculadas lo suficientemente rápido y con precisión. El método de la *transformada rápida de Fourier (Fast Fourier Transform)*(FFT) puede adaptarse para cumplir ambos objetivos. Desarrollamos aquí el material necesario para relacionar el método de la transformada rápida de Fourier con las integrales de residuo que está basado en la referencia [PTVF92].

La transformada rápida de Fourier puede aplicarse para calcular numéricamente integrales que son de la forma,

$$I(\omega) = \int_a^b d\phi e^{i\omega\phi} h(\phi). \quad (\text{C.3})$$

Las integrales de residuo  $R_n^{j_1, \dots, j_M}$  se pueden reescribir en la anterior expresión con las siguientes igualdades:

$$h(\phi) \equiv \frac{1}{2\pi} \prod_{k \neq j_1, \dots, j_M} (u_k^2 + e^{i\phi} v_k^2), \quad \omega \equiv -(n_0 - n), \quad a \equiv 0 \quad b \equiv 2\pi. \quad (\text{C.4})$$

La aproximación consiste en dividir el intervalo  $[a, b]$  en  $M$  subintervalos, y definir las siguientes cantidades:

$$\Delta \equiv \frac{b-a}{M}, \quad \phi_j \equiv a + j\Delta, \quad h_j \equiv h(\phi_j), \quad j = 0, \dots, M. \quad (\text{C.5})$$

Donde obviamente,  $h_0 = h(a)$  y  $h_M = h(b)$ . Con estas definiciones la integral  $I(\omega)$  puede aproximarse por la siguiente suma,

$$I(\omega) \approx \Delta \sum_{j=0}^{M-1} h_j e^{i\omega \phi_j}. \quad (\text{C.6})$$

Para ciertos valores de las cantidades  $\omega$  y  $M$ , la suma en (C.6) puede verse como una transformada de Fourier discreta, la cual puede ser evaluada eficientemente mediante el algoritmo de la transformada rápida de Fourier. Concretamente podemos elegir el número  $M$  como un número entero potencia de 2 ( $M = 2^n$ ), y definir un conjunto discreto de  $\omega$ 's mediante

$$\omega_m \equiv \frac{2\pi m}{M\Delta}, \quad (\text{C.7})$$

donde  $m$  toma los valores  $m = 0, 1, \dots, M/2 - 1$ . En consecuencia la expresión (C.6) pasa a ser

$$I(\omega_m) \approx \Delta e^{i\omega_m a} \sum_{j=0}^{M-1} h_j e^{2\pi i m j / M}. \quad (\text{C.8})$$

Notemos que la suma en la última expresión se trata de una transformada discreta de Fourier. Antes de seguir analizando esta expresión identifiquemos la relación entre los valores de  $m$  con respecto a los parámetros originales en las integrales de Residuo. Juntando las igualdades (C.5) y (C.7) se llega a

$$\omega_m = m, \quad m = n_0 - n. \quad (\text{C.9})$$

Como vemos el número entero  $m$  que define para que valor de  $\omega$  se realiza la transformada de Fourier resulta ser en nuestro caso la diferencia entre el número de pares  $n_0$  y el orden de la integral de residuo  $n$ .

A pesar de la sencillez de la expresión (C.8) ésta esconde un comportamiento que puede dar resultados insatisfactorios. La razón reside en la naturaleza oscilatoria del integrando de (C.3), si

$h(\phi)$  es una función suave, y si  $\omega$  es lo suficientemente grande como para dar varios ciclos en  $[a, b]$  ( $\omega_m$  realiza exactamente  $m$  ciclos), el valor en la integral  $I$  resulta afectado en su precisión numérica, notemos que ésta será más severa cuanto mayor sea  $\omega_m$ , en nuestro caso será cuanto mayor sea el número de pares  $n_0$ , esto es, el tamaño del sistema. En consecuencia, es necesario un tratamiento más sofisticado.

La mejora consiste en *interpolar* la función  $h(\phi)$  en el intervalo  $[a, b]$  a partir de los puntos de muestreo  $h_j$ . De esta forma podemos aproximar la función  $h(\phi)$  en todo punto. Obviamente la aproximación más sencilla consiste en la interpolación lineal, usando únicamente dos puntos  $h_j$ . Una aproximación mejor consiste en la interpolación cúbica.

Las fórmulas para las interpolaciones son ciertos polinomios en la variable  $\phi$ , cuyos coeficientes son funciones lineales de los  $h_j$ . La función  $h(\phi)$  puede ser escrita de la forma:

$$h(\phi) \approx \sum_{j=0}^M h_j \psi\left(\frac{\phi - \phi_j}{\Delta}\right) + \sum_{j=\text{ptsfinales}} h_j \varphi_j\left(\frac{\phi - \phi_j}{\Delta}\right) \quad (\text{C.10})$$

Como vemos, la función interpolada  $h(\phi)$  puede verse como una suma de las funciones  $\psi$  y  $\varphi$  (que dependen exclusivamente del esquema de interpolación) multiplicadas por los valores muestreados  $h_j$  (que depende de la función  $h(\phi)$ ). El segundo término de la suma hace referencia a los valores que toma la función  $h$  en los extremos, aquí es necesario diferentes fórmula de interpolación, por esta razón aparecen las funciones  $\varphi_j$ .

Llevando la expresión (C.10) a la integral original  $I$ , obtenemos el resultado:

$$I(\omega) \approx \Delta e^{i\omega a} \left[ W(\theta) \sum_{j=0}^M h_j e^{ij\theta} + \sum_{j=\text{ptsfinales}} h_j \alpha_j(\theta) \right]. \quad (\text{C.11})$$

Donde se ha hecho  $\theta = \omega\Delta$ , y las funciones  $W(\theta)$  y  $\alpha_j(\theta)$  están definidas por

$$W(\theta) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{i\theta s} \psi(s) \quad (\text{C.12})$$

$$\alpha_j(\theta) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} ds e^{i\theta s} \varphi_j(s - j). \quad (\text{C.13})$$

Lo importante es que ambas expresiones (C.12) y (C.13) pueden ser evaluadas analíticamente una vez elegido el orden de interpolación. Finalmente la expresión (C.11) puede evaluarse mediante el algoritmo de la transformada rápida de Fourier, veamos como puede realizarse. La primera de las sumas en (C.11) se evalúa de la forma siguiente, se escoge un entero  $K$  potencia de 2 cumpliendo  $K \geq M + 1$ . Si  $K > M + 1$ , definimos  $h_j \equiv 0$ ,  $M + 1 < j \leq K - 1$ . De modo que la suma puede realizarse como suma de Fourier discreta para los valores  $\omega = \omega_l$  dados por

$$\omega_l \equiv \frac{2\pi l}{K\Delta} \equiv \theta \quad l = 0, 1, \dots, \frac{K}{2} - 1. \quad (\text{C.14})$$

Fijado  $M$ , el muestreo es más fino cuanto mayor sea  $K$ . Por otro lado, el valor de  $M$  determina la frecuencia accesible  $\omega$  más alta, porque  $\Delta$  decrece cuando  $M$  aumenta, y el valor más grande de  $\omega\Delta$  esta siempre por debajo de  $\pi$ , véase (C.14). Como regla práctica es conveniente escoger  $K$  al menos cuatro veces mayor que  $M$ ,  $K > 4M$ . La expresión final para la integral  $I(\omega_l)$  resulta ser:

$$\begin{aligned}
 I(\omega_l) &= \Delta e^{i\omega_l a} W(\theta) \sum_{j=0}^{K-1} h_j e^{2\pi i l_j / K} + \\
 &+ \alpha_0(\theta) h_0 + \alpha_1(\theta) h_1 + \alpha_2(\theta) h_2 + \alpha_3(\theta) h_3 + \dots \\
 &+ e^{i\omega(b-a)} [\alpha_0^*(\theta) h_M + \alpha_1^*(\theta) h_{M-1} + \alpha_2^*(\theta) h_{M-2} + \alpha_3^*(\theta) h_{M-3} + \dots] \quad (C.15)
 \end{aligned}$$

Para ordenes de interpolación cúbicos o menores la mayoría de los términos que aparecen arriba no son cero, en consecuencia sólo necesitamos expresiones para las funciones  $W, \alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ . En este trabajo se ha conseguido suficiente precisión usando el orden trapezoidal, para el cual se tienen:

$$\begin{aligned}
 W(\theta) &= \frac{2(1 - \cos \theta)}{\theta^2} \\
 \alpha_0 &= -\frac{1 - \cos \theta}{\theta^2} + i \frac{\theta - \sin \theta}{\theta^2} \\
 \alpha_1 &= \alpha_2 = \alpha_3 = 0
 \end{aligned}$$

Apéndice D

## LAS INTEGRALES DE RESIDUO GENERALIZADAS. SOLAPES DE LA NORMA Y EL HAMILTONIANO EN EL MCG

En este apéndice calculamos las expresiones del solape y de la norma (8.6) y del Hamiltoniano (8.7) y explicamos como calcular eficientemente estas expresiones.

Comencemos desarrollando la expresión del solape de la norma (8.6):

$$|BCS(\xi)\rangle_N = -i \oint \frac{dz}{2\pi} z^{-(n_0+1)} \prod_k (u_k(\xi) + zv_k(\xi)) \quad (D.1)$$

$$\begin{aligned} \langle BCS(\xi)|BCS(\xi')\rangle_N &= \frac{1}{4\pi^2} \oint dz' dz^* (z')^{-n_0-1} (z^*)^{-n_0-1} \prod_k (u_k(\xi)u_k(\xi') + z'z^*v_k(\xi)v_k(\xi')) = \\ &= \frac{-2\pi i}{4\pi^2} \oint dz z^{-n_0-1} \prod_k (u_k(\xi)u_k(\xi') + zv_k(\xi)v_k(\xi')) = \\ &= \frac{-(2\pi i)^2}{4\pi^2} R_0^0(\xi, \xi') = R_0^0(\xi, \xi') \end{aligned} \quad (D.2)$$

Pasemos ahora al solape del Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \langle BCS(\xi)|H|BCS(\xi')\rangle_N &= 2 \sum_{k,\sigma} \langle BCS(\xi)|c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}|BCS(\xi')\rangle_N \\ &\quad -G \langle BCS(\xi)|c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k-} c_{k+}|BCS(\xi')\rangle_N \end{aligned} \quad (D.3)$$

Calculemos por separado los dos términos:

a)  $\langle BCS(\xi)|c_k^\dagger c_k|BCS(\xi')\rangle_N$

$$\begin{aligned}
 \langle BCS(\xi) | c_k^\dagger c_k | BCS(\xi') \rangle_N &= \frac{1}{4\pi^2} \oint dz_1 dz_2 z_1^{-n_0-1} (z_2^{-n_0-1}) \times \\
 &\quad \langle - | \prod_j \left( u_j^*(\xi) + z_2^* v_j(\xi) c_{j-} c_{j+} \right) c_k^\dagger c_k \left( u_j(\xi') + z_1 v_j(\xi') c_{j+}^\dagger c_{j-}^\dagger \right) | - \rangle = \\
 &= \frac{1}{4\pi^2} \oint dz_1 dz_2^* z_1^{-n_0-1} (z_2^*)^{-n_0-1} v_k(\xi) v_k(\xi') z_1 z_2^* \prod_{j \neq k} \left( u_j(\xi) v_j(\xi) + z_1 z_2^* v_j(\xi) v_j(\xi') \right) = \\
 &= \frac{-2\pi i}{4\pi^2} \oint dz z^{-(n_0-1)-1} v_k(\xi) v_k(\xi') \prod_{j \neq k} \left( u_j(\xi) u_j(\xi') + z v_j(\xi) v_j(\xi') \right) = \\
 &\quad v_k(\xi) v_k(\xi') R_1^k(\xi, \xi')
 \end{aligned} \tag{D.4}$$

b)  $\langle BCS(\xi) | c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+} | BCS(\xi') \rangle_N$

Consta de dos partes:

b1)  $k = k', \langle BCS(\xi) | c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+} | BCS(\xi') \rangle_N$

$$\begin{aligned}
 \langle BCS(\xi) | c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+} | BCS(\xi') \rangle_N &= \\
 &= \frac{-2\pi i}{4\pi^2} \oint dz z^{-n_0-1} \prod_{j \neq k} \left( u_j(\xi) u_j(\xi') + z v_j(\xi) v_j(\xi') \right) z v_k(\xi) v_k(\xi') = \\
 &\quad v_k(\xi) v_k(\xi') R_1^k(\xi, \xi')
 \end{aligned} \tag{D.5}$$

b2)  $k \neq k', \langle BCS(\xi) | c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+} | BCS(\xi') \rangle_N$

$$\begin{aligned}
 \langle BCS(\xi) | c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger c_{k'-} c_{k'+} | BCS(\xi') \rangle_N &= \\
 &= -\frac{1}{4\pi^2} \oint dz_1 dz_2 z_1^{-n_0-1} z_2^{-n_0-1} \times \\
 &\quad \langle - | \prod_j \left( u_j(\xi) + z_1 v_j(\xi) c_{j-} c_{j+} \right) c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger = c_{k'-} c_{k'+} \prod_j \left( u_j(\xi') + z_2 v_j(\xi') c_{j+}^\dagger c_{j-}^\dagger \right) | - \rangle = \\
 &= \frac{-2\pi i}{4\pi^2} \oint dz z^{-(n_0-1)-1} \prod_{j \neq k, k'} \left( u_j(\xi) u_j(\xi') + z v_j(\xi) v_j(\xi') \right) u_k(\xi') v_k(\xi) u_{k'}(\xi) v_{k'}(\xi') = \\
 &\quad u_k(\xi') v_k(\xi) u_{k'}(\xi) v_{k'}(\xi') R_1^{kk'}(\xi, \xi')
 \end{aligned} \tag{D.6}$$

Juntando todo obtenemos finalmente la expresión para el solape del Hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
 \langle BCS(\xi) | H | BCS(\xi') \rangle_N &= 2 \sum_k \left( \epsilon_k - \frac{G}{2} \right) v_k(\xi) v_k(\xi') R_1^k(\xi, \xi') - \\
 &\quad G \sum_{k, l, k \neq l} u_k(\xi') v_l(\xi) u_k(\xi) v_l(\xi') R_1^{kl}(\xi, \xi')
 \end{aligned} \tag{D.7}$$



Pasemos ahora a explicar como calcular estas expresiones de la forma más eficaz posible de cara a la implementación numérica.

Veamos primero las alternativas para calcular las integrales de residuo generalizadas. Es fácil probar que obedecen a la fórmula de recurrencia encontrada por Dietrich (B.30) pero ahora usando las integrales de residuo generalizadas:

$$R_m^{j_1 \dots j_M}(\xi, \xi') = u_k(\xi)u_k(\xi')R_m^{j_1 \dots j_M, k}(\xi, \xi') + v_k(\xi)v_k(\xi')R_{m+1}^{j_1 \dots j_M, k}(\xi, \xi') \quad (\text{D.8})$$

Las integrales de residuo  $R_1^k, R_1^{kl}$  necesarias para calcular  $\mathcal{H}_{\xi, \xi'}$  pueden ser evaluadas en términos de  $R_0^k$  y  $R_0^{kl}$  usando la relación (D.8) dos veces:

$$R_1^k(\xi, \xi') = \frac{R_0^k(\xi, \xi') - u_k(\xi)u_k(\xi')R_0^k(\xi, \xi')}{v_k(\xi)v_k(\xi')} \quad (\text{D.9})$$

$$R_1^{kl}(\xi, \xi') = \frac{R_0^{kl}(\xi, \xi') - u_k(\xi)u_k(\xi')R_0^{kl}(\xi, \xi')}{v_k(\xi)v_k(\xi')} \quad (\text{D.10})$$

Sin embargo, usando este método para calcular el solape del Hamiltoniano conlleva demasiado tiempo de cálculo, y hace que esta forma sea muy lenta e ineficaz. Para realizar más rápidamente el cálculo proponemos la siguiente rutina que hemos usado en nuestros cálculos. Podemos escribir el solape del Hamiltoniano de la siguiente forma:

$$\mathcal{H}_{\xi, \xi'} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \left[ F_1^\phi(\xi, \xi') - F_2^\phi(\xi, \xi') \right] \quad (\text{D.11})$$

donde las funciones  $F_1^\phi(\xi, \xi')$  y  $F_2^\phi(\xi, \xi')$  absorben la dependencia en la coordenada gauge  $\phi$  y están dadas por:

$$F_1^\phi(\xi, \xi') = 2 \sum_j \left( \epsilon_j - \frac{G}{2} \right) v_j(\xi)v_j(\xi') e^{i\phi/2} \prod_{k \neq j} \left( e^{-i\phi/2} u_k(\xi)u_k(\xi') + e^{i\phi/2} v_k(\xi)v_k(\xi') \right) \quad (\text{D.12})$$

$$F_2^\phi(\xi, \xi') = G \sum_{ij} u_i(\xi')v_i(\xi)u_j(\xi)v_j(\xi') \prod_{k \neq ij} \left( e^{-i\phi/2} u_k(\xi)u_k(\xi') + e^{i\phi/2} v_k(\xi)v_k(\xi') \right) \quad (\text{D.13})$$

Estas integrales, a su vez, pueden ser evaluadas usando la transformada rápida de Fourier explicada en el apéndice C.



## OBTENCIÓN DE LAS ECUACIONES DE RICHARDSON

Este apéndice está dedicado a analizar el método de Richardson y su derivación. Seguiremos las líneas de sus publicaciones originales [RS64, Ric65]. La diferencia más importante entre las aplicaciones en Física Mesoscópica y Física Nuclear es que en la primera se deben considerar sistemas más grandes que en la segunda.

El primer paso del argumento original de Richardson se basa en el efecto de bloqueo: como los niveles que están ocupados por una única partícula no intervienen en la dinámica del sistema pueden ser excluidos del modelo. En consecuencia es suficiente considerar el Hamiltoniano modificado,

$$H' = \sum_j 2 \epsilon_j b_j^\dagger b_j - g \sum_{jj'} b_j^\dagger b_{j'}, \quad (\text{E.1})$$

donde los operadores  $b_j$ 's son los operadores de pares,  $b_j = c_{j-} c_{j+}$  que obedecen a los conmutadores  $[b_j, b_{j'}^\dagger] = \delta_{jj'}(1 - 2b_j^\dagger)$ .

En un primer acercamiento la dinámica del sistema parece trivial, pues el hamiltoniano es cuadrático. Sin embargo, la complicación reside en que los operadores  $b_j$ 's constan de operadores fermiónicos que obedecen el principio de Pauli, así que la dinámica se complica por este entrelazamiento: no más de un bosón- $b$  puede ocupar un nivel individual a cada momento. Este hecho junto con las no triviales relaciones de conmutación hace que una diagonalización en términos sencillos sea imposible.

### E.1 El principio de Pauli.

Richardson y Sherman [RS64] aciertan a expresar el principio de Pauli no en términos de las relaciones de conmutación sino por una ligadura en la función de onda. El *Ansatz* más general posible para un autoestado  $|\Phi\rangle^N$  es

$$|\Phi\rangle^N = \sum_{j_1 \dots j_{n_0}} \Phi(j_1 \dots j_{n_0}) b_{j_1}^\dagger \dots b_{j_{n_0}}^\dagger |-\rangle \quad (\text{E.2})$$

Como todos los términos en la suma con dos índices  $j_k$ 's iguales se anula, pues  $b_j^2 = 0$ , las correspondientes  $\Phi$ 's no están definidas. Richardson reemplaza los cuasi-bosones  $b_j$  por bosones

reales  $\beta_j$  satisfaciendo  $[\beta_j, \beta_{j'}] = \delta_{jj'}$  y restringe a  $\Phi$  ser cero siempre que dos índices sean iguales para compensar la propiedad  $b_j^2 = 0$  que los bosones reales no satisfacen. Esto se consigue escribiendo

$$|\Phi\rangle_N = \sum_{j_1 \dots j_{n_0}} \Phi(j_1 \dots j_{n_0}) \beta_{j_1}^\dagger \dots \beta_{j_{n_0}}^\dagger |-\rangle, \quad (\text{E.3})$$

$$\Phi(j_1 \dots j_{n_0}) = \theta(j_1 \dots j_{n_0}) \varphi(j_1 \dots j_{n_0}) \quad \text{con} \quad (\text{E.4})$$

$$\theta(j_1 \dots j_{n_0}) = \prod_{k < l}^{n_0} (1 - \delta_{j_k j_l}). \quad (\text{E.5})$$

Richardson and Sherman mostraron en ?? que calculando  $\langle \Phi | \Phi \rangle_N$  y

$$\begin{aligned} \langle \Phi | H' | \Phi \rangle_N &= \sum_{j_1 \dots j_{n_0}} 2(\epsilon_{j_1} \dots \epsilon_{j_{n_0}}) |\Phi(j_1 \dots j_{n_0})|^2 - \\ &- g \sum_{k=1}^{n_0} \sum_{j_1 \dots j_{k-1}, j_{k+1} \dots j_{n_0}, j, j'} \Phi^*(j_1 \dots j_{k-1}, j, j_{k+1} \dots j_{n_0}) \Phi(j_1 \dots j_{k-1}, j', j_{k+1} \dots j_{n_0}) \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

por medio del ansatz (E.4) el término extra en las relaciones de conmutación de los  $b'$ s (proporcional a  $b_j^\dagger b_j$ ) se cancela, y los operadores  $b'$ s pueden ser reemplazados por los  $\beta'$ s. En otras palabras: las mismas expresiones para  $\langle \Phi | \Phi \rangle_N$  y  $\langle \Phi | H' | \Phi \rangle_N$  son obtenidas por usando  $\beta'$ s y  $b'$ s con las respectivas relaciones de conmutación. La propiedad  $b_j^2 = 0$  es trivialmente satisfecha cuando  $\Phi$  se anula para dos índices iguales.

## E.2 La solución de la ecuación de Schrödinger

En la sección anterior el problema original de encontrar los autovalores del Hamiltoniano de un sistema de cuasi-bosones interactuantes ha sido reducido a uno donde son bosones los que interactúan, pero con una ligadura. Richardson y Sherman procedieron a resolver la ecuación de Schrödinger bajo esta ligadura. De acuerdo al principio variacional, la ecuación de Schrödinger puede ser obtenida mediante el requisito,

$$\frac{\delta \langle \Phi | H' - E | \Phi \rangle_N}{\delta \Phi(j_1 \dots j_{n_0})} = 0 \quad (\text{E.7})$$

donde la normalización de  $|\Phi\rangle_N$  y la propiedad (E.4) han sido asumidas. Evaluando la ecuación variacional usando (E.6) conduce a la ecuación de Schrödinger

$$\begin{aligned} &\theta(j_1 \dots j_{n_0}) \left[ (2\epsilon_{j_1} + \dots + 2\epsilon_{j_{n_0}} - E) \varphi(j_1 \dots j_{n_0}) \right. \\ &\left. - g \sum_{k=1}^{n_0} \sum_j \left( 1 - \sum_{l \neq k} \delta_{j l} \right) \varphi(j_1 \dots j_{k-1}, j, j_{k+1} \dots j_{n_0}) \right] = 0 \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

La variación correspondiente a  $\Phi^*$  da la misma ecuación que para  $\Phi$  y por tanto  $\Phi$  puede ser elegida real. La existencia del factor global  $\theta(\dots)$  en la ecuación de Schrödinger (E.8) es trivialmente satisfecho para cualquier  $\varphi(\dots)$  con dos argumentos idénticos, dejando la elección de ignorar el factor  $\theta$  pues la correspondiente  $\varphi$ 's para las cuales  $\theta(\dots)$  se anula son irrelevantes en cualquier caso.

Richardson y Sherman resolvieron la ecuación de Schrödinger escribiendo un ansatz inspirado por la solución de un sistema puramente bosónico. Si olvidamos por el momento la propiedad de los cuasi bosones  $b$ 's y los reemplazamos por bosones reales  $\beta$ , el Hamiltoniano  $H'_{bos} = \sum_j 2\epsilon_j \beta_j^\dagger \beta_j - g \sum_{j,j'} \beta_j^\dagger \beta_{j'}$  es diagonalizado por la transformación

$$B_l = g C_l \sum_k (2\epsilon_k - e_l)^{-1} \beta_k, \quad (\text{E.9})$$

con  $e_l$  y  $C_l$  determinadas por

$$\frac{1}{g} = \sum_k (2\epsilon_k - e_l)^{-1} \quad \text{y} \quad (g C_l)^{-2} = \sum_k (2\epsilon_k - e_l)^{-2}. \quad (\text{E.10})$$

La energía total es  $E = \sum_k e_k$  y la función de onda viene dada salvo un factor de normalización por:

$$\Phi_{bosones}(j_1 \dots j_{n_0}) \propto \sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P} \left\{ \prod_{k=1}^{n_0} (2\epsilon_{j_k} - e_{p(k)})^{-1} \right\}, \quad (\text{E.11})$$

donde  $\sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P}$  es la suma sobre todas las permutaciones de  $1 \dots n_0$ . Introduciendo la función de onda bosónica en la ecuación de Schrödinger (E.8) y tomando los  $e_k$  como parámetros libres obtendremos un conjunto de ecuaciones para los  $e_k$ . El cálculo se basa en una expansión de fracciones parcial asumiendo que  $e_k \neq e_l$  para  $k \neq l$ .

El primer término de (E.8) da

$$(2\epsilon_{j_1} + \dots + 2\epsilon_{j_{n_0}} - E) \varphi(j_1 \dots j_{n_0}) = \sum_{k=1}^{n_0} \sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P} \left\{ \prod_{l \neq k}^{n_0} (2\epsilon_{j_l} - e_{p(k)})^{-1} \right\} \quad (\text{E.12})$$

la primera parte del segundo término de (E.8) resulta ser

$$\begin{aligned} & g \sum_{k=1}^{n_0} \sum_j \varphi(j_1 \dots j_{k-1}, j, j_{k+1} \dots j_{n_0}) \\ &= g \sum_{k=1}^{n_0} \sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P} \left\{ \sum_j (2\epsilon_j - e_{p(k)})^{-1} \prod_{l \neq k}^{n_0} (2\epsilon_{j_l} - e_{p(k)})^{-1} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

Para evaluar la segunda parte del segundo término de (E.8), consideremos

$$= \sum_{\mathcal{P}} \varphi(j_1 \cdots j_{k-1}, j_l, j_{k+1} \cdots j_{n_0}) \left\{ (2\epsilon_{j_l} - e_{p(k)})^{-1} (2\epsilon_{j_l} - e_{p(l)})^{-1} \prod_{m \neq k, l} (2\epsilon_{j_m} - e_{p(m)})^{-1} \right\}. \quad (\text{E.14})$$

Si todos los  $e_k$ 's son distintos, podemos usar la expansión fraccional parcial

$$\begin{aligned} (2\epsilon_{j_l} - e_{p(k)})^{-1} (2\epsilon_{j_l} - e_{p(l)})^{-1} &= (e_{p(l)} - e_{p(k)})^{-1} \left[ (2\epsilon_{j_l} - e_{p(l)})^{-1} - (2\epsilon_{j_l} - e_{p(k)})^{-1} \right] \\ &= (1 + \mathcal{P}_{kl})(e_{p(l)} - e_{p(k)})^{-1} (2\epsilon_{j_l} - e_{p(l)})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

donde  $\mathcal{P}_{kl}$  denota la permutación entre  $p(k)$  y  $p(l)$ . Usando la identidad  $(\sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P})\mathcal{P}_{kl} = \sum_{\mathcal{P}} \mathcal{P}$  y poniendo las ecuaciones (E.12), (E.13) y (E.14) juntas, llegamos a la ecuación de Schrödinger

$$\sum_{k=1}^{n_0} \sum_{\mathcal{P}} \left\{ \left[ 1 + 2g \sum_{l \neq k} (e_{p(l)} - e_{p(k)})^{-1} - g \sum_j (2\epsilon_j - e_{p(k)})^{-1} \right] \prod_{l \neq k} (2\epsilon_{j_k} - e_{p(k)})^{-1} \right\} = 0, \quad (\text{E.16})$$

o, de forma más simple, las *ecuaciones de Richardson*

$$\frac{1}{g} + \sum_{l=1, l \neq k}^{n_0} \frac{2}{e_l - e_k} = \sum_{j=1}^{2n_0} \frac{1}{2\epsilon_j - e_k}, \quad k = 1 \dots n_0. \quad (\text{E.17})$$

Que representa un conjunto de ecuaciones algebraicas para las  $n_0$  incógnitas  $e_k$ . Las ecuaciones (E.17) se han obtenido bajo el supuesto de que todas las  $e_k$  son distintas. Cuando al menos dos de las  $e_k$  son iguales, las ecuaciones se llaman *singulares*. Sin embargo, en [Ric65] Richardson demostró que este puntos singulares suceden en valores discretos de la constante  $g$ , en la cual dos de las variables  $e_k$  se hacen iguales entre sí e iguales a un valor de  $\epsilon_k$ , y que la solución en estos puntos puede ser obtenida mediante un cierto procedimiento de límite. A pesar de que las  $e_k$  son singulares en ciertos valores de la constante de interacción  $g$ , la energía total  $E = \sum_k^{n_0} e_k$  permanece analítica. Las singularidades en las  $e_k$  se cancelan en la suma.

### E.3 Implementación numérica

Como quiera que las ecuaciones de Richardson (E.17) tienen puntos singulares y que las incógnitas  $e_k$  son complejas en general, las ecuaciones de Richardson involucran aritmética compleja. Desde el punto de vista numérico la solución no parece sencilla. Dedicamos en este apéndice algunas palabras acerca de su resolución.

Richardson mostró en [Ric66] los pasos necesarios para resolver numéricamente el conjunto de ecuaciones (E.17). En pocas palabras Richardson primero transforma las ecuaciones en sus partes reales e imaginarias, reescribiendo las ecuaciones en nuevas variables las cuales no contienen singularidades, y resolviendo numéricamente el conjunto de ecuaciones resultante. La transformación que daremos aquí es más general que la transformación dada por el propio Richardson en [Ric66],

y el procedimiento numérico para resolver el conjunto de ecuaciones resultante está basado en el algoritmo de Broyden [Bro65].

El primer paso consiste en separar las ecuaciones en su parte real e imaginaria introduciendo un nuevo conjunto de variables:

$$e_{2\lambda-1} = \xi_\lambda - i\eta_\lambda, \quad y \quad (E.18)$$

$$e_{2\lambda} = \xi_\lambda + i\eta_\lambda \quad \text{con} \quad \lambda = 1, \dots, n_0/2 \quad (E.19)$$

donde el hecho de que  $e_k$  aparece sólo en pares complejo conjugados ha sido utilizado reagrupando las  $e_k$  de forma que las soluciones complejo conjugadas tengan índices vecinos. Si el número de pares  $n_0$  es impar entonces una variable  $e_k$  se toma real.

Las ecuaciones (E.17) quedan reescritas en términos de  $\xi_\lambda$  y  $\eta_\lambda$ :

$$\frac{1}{g} - \sum_{\mu} \frac{4\xi_{\lambda\mu}(\xi_{\lambda\mu}^2 + \eta_\lambda^2 + \eta_\mu^2)}{(\xi_{\lambda\mu}^2 + \eta_\lambda^2 + \eta_\mu^2)^2 - 4\eta_\lambda^2\eta_\mu^2} - \sum_j \frac{2\epsilon_j - \xi_\lambda}{(2\epsilon_j - \xi_\lambda)^2 + \eta_\lambda^2} = 0 \quad (E.20)$$

$$1 + \sum_{\mu} \frac{4\eta_\lambda^2(\xi_{\lambda\mu}^2 + \eta_\lambda^2 - \eta_\mu^2)^2}{\xi_{\lambda\mu}^2 + \eta_\lambda^2 + \eta_\mu^2)^2 - 4\eta_\lambda^2\eta_\mu^2} - \sum_j \frac{\eta_\lambda^2}{(\epsilon_j - \xi_\lambda)^2 + \eta_\lambda^2} = 0 \quad (E.21)$$

Una transformación más es necesaria para aislar los puntos singulares. Además, por conveniencia, las energías de partícula independiente  $\epsilon_j$  quedan absorbidas en las nuevas variables reales:

$$\xi_\lambda = (\epsilon_{2\lambda-1} + \epsilon_{2\lambda}) + \delta\epsilon_\lambda x_\lambda, \quad \delta\epsilon_\lambda \equiv \epsilon_{2\lambda} - \epsilon_{2\lambda-1} \quad (E.22)$$

$$\eta_\lambda^2 = -(\delta\epsilon_\lambda)^2(1 - x_\lambda^2)y_\lambda \quad (E.23)$$

Los puntos singulares están en  $x_\lambda = \pm 1$ , esto es, cuando  $\xi_\lambda$  resulta igual a  $\epsilon_{2\lambda-1}$  o  $\epsilon_{2\lambda}$  y  $\eta_\lambda^2$  cambia de signo:  $e_{2\lambda-1}$  y  $e_{2\lambda}$  son iguales en este punto y cambian de ser reales a ser complejos, o viceversa. Como una interacción atractiva bajará los  $e_k$  comparados a los  $\epsilon_j$  el último caso  $x_\lambda = +1$  no tiene importancia.

Sólo los términos donde  $\mu = \lambda$  en las sumas de (E.20),(E.21) y  $j = 2\lambda - 1$  o  $j = 2\lambda$  son expresadas por  $x_\lambda$  y  $y_\lambda$ . Esto lleva a:

$$\frac{1}{g} - \frac{1}{\delta\epsilon_\lambda} \frac{2x_\lambda(1 + y_\lambda)}{(1 - y_\lambda)^2 - (1 + y_\lambda)^2 x_\lambda^2} + 4 \sum_{\mu} \frac{\xi_{\lambda\mu}(\xi_{\lambda\mu}^2 + \eta_\lambda^2 + \eta_\mu^2)}{(\xi_{\lambda\mu}^2 + \eta_\lambda^2 + \eta_\mu^2)^2 - 4\eta_\lambda^2\eta_\mu^2} - \sum_j \frac{2\epsilon_j - \xi_\lambda}{(2\epsilon_j - \xi_\lambda)^2 + \eta_\lambda^2} = 0, \quad (E.24)$$

$$\frac{1}{\delta\epsilon_\lambda} \frac{1 - y_\lambda^2}{(1 - y_\lambda)^2 - (1 + y_\lambda)^2 x_\lambda^2} - 4y_\lambda \sum_{\mu} \frac{\xi_{\lambda\mu}^2 + \eta_\lambda^2 - \eta_\mu^2}{(\xi_{\lambda\mu}^2 + \eta_\lambda^2 + \eta_\mu^2)^2 - 4\eta_\lambda^2\eta_\mu^2} + y_\lambda \sum_j \frac{1}{(2\epsilon_j - \xi_\lambda)^2 + \eta_\lambda^2} = 0. \quad (E.25)$$

La expresión utilizada arriba  $\sum'$  indica que los términos con  $\mu = \lambda$  y  $j = 2\lambda - 1$  o  $j = 2\lambda$  no están incluidas en las sumatorias. En la última ecuación el término  $(1 - x_\lambda^2)$  ha sido factorizado. Los términos resultantes no divergen en  $x_\lambda = \pm 1$  siempre cuando  $y_\lambda > 0$  lo que es cierto para la solución real.

El grupo de ecuaciones (E.24),(E.25) puede ser resuelto fácilmente en un ordenador usando, por ejemplo, el algoritmo de Broyden [Bro65] para resolver sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales. Las ecuaciones (E.24),(E.25) poseen todas las soluciones que corresponden a todo el espectro de energías, es decir, contienen todos los autovalores del Hamiltoniano de apareamiento. Para controlar que solución se obtiene, los valores iniciales de los  $e_k$  son preparados en el estado con interacción nula correspondiente y se resuelven numéricamente las ecuaciones (E.24),(E.25) incrementando gradualmente la constante de interacción  $g$  hasta que se llega a la interacción deseada.

La idea detrás de esta forma de resolverlo es que los estados del sistema interactuante evolucionan continuamente con la interacción  $g$  y están emparejados por la correspondencia uno a uno de los estados no interactuantes.



## LIGADURAS EN LA TEORÍA BCS Y PBCS

### F.1 Ligaduras en la teoría BCS

En este apéndice vamos a dar el desarrollo matemático de cómo realizar las ligaduras de las coordenadas generadoras  $\Delta N^2$  dentro de la teoría BCS. El objetivo es construir estados  $|BCS(\Delta N^2)\rangle$ . La forma de hacerlo es usar un Hamiltoniano modificado  $H'$  el cual incluya esta ligadura:

$$H' = H - \mu \hat{N} - \mu_2 \Delta N^2 \quad (\text{F.1})$$

donde

$$\Delta N^2 = \langle BCS | \hat{N}^2 | BCS \rangle - \langle BCS | \hat{N} | BCS \rangle^2 \quad (\text{F.2})$$

El operador  $\hat{N}^2$  es  $\hat{N}^2 = \sum_{kk'} (c_{k+}^\dagger c_{k+} + c_{k-}^\dagger c_{k-}) (c_{k'+}^\dagger c_{k'+} + c_{k'-}^\dagger c_{k'-})$ . Cada término produce un factor  $2v_k^2 \times 2v_{k'}^2$  contando el número de estados de partícula individual. Este resultado cambia para los términos diagonales  $k = k'$ , donde sólo contribuye el factor  $4v_k^2$ . En consecuencia obtenemos:

$$\langle BCS | N^2 | BCS \rangle = 4 \sum_{k \neq k'} v_k^2 v_{k'}^2 + 4 \sum_k v_k^2 \quad (\text{F.3})$$

Combinando este resultado con  $\langle BCS | \hat{N} | BCS \rangle = 2 \sum_k v_k^2$  y usando  $u_k^2 = 1 - v_k^2$  obtenemos

$$\Delta N^2 = 4 \sum_k u_k^2 v_k^2 \quad (\text{F.4})$$

El cálculo de la energía usando el Hamiltoniano  $H'$  resulta:

$$\langle BCS | H' | BCS \rangle = 2 \sum_k (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - G \left( \sum_k u_k v_k \right)^2 - G \sum_k v_k^4 - 4\mu_2 \sum_k u_k^2 v_k^2 \quad (\text{F.5})$$

Minimicemos ahora la expresión de la energía  $\delta \langle H' \rangle = 0$ :

$$\delta\langle H' \rangle = 4(\epsilon_k - \mu) v_k - 2G \left( \sum_{k'} u_{k'} v_{k'} \right) u_k - 4G v_k^3 - \frac{v_k^2}{u_k} \left( -2G \left( \sum_{k'} u_{k'} v_{k'} \right) \right) - 8\mu_2 v_k (u_k^2 - v_k^2) = 0 \quad (\text{F.6})$$

Manipulando esta expresión encontramos el conjunto de ecuaciones variacionales:

$$2(\tilde{\epsilon}_k - \tilde{\mu}) u_k v_k - \Delta (u_k^2 - v_k^2) = 0 \quad (\text{F.7})$$

Con

$$\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k + (4\mu_2 - G) v_k^2, \quad \tilde{\mu} = \mu + 2\mu_2 \quad (\text{F.8})$$

La ventaja de estas ecuaciones es que tienen la misma estructura que las usuales en la teoría BCS. En consecuencia la forma de resolver las ecuaciones (F.8) procede de la misma forma que para el grupo de ecuaciones usuales BCS. Las amplitudes  $v_k$  y  $u_k$  quedan expresadas por:

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right), \quad u_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}} \right) \quad (\text{F.9})$$

Estas amplitudes han de satisfacer la ecuación del gap:

$$\frac{2}{G} = \sum_k \frac{1}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_k^2 + \Delta^2}} \quad (\text{F.10})$$

Los parámetros  $\mu$  y  $\mu_2$  aseguran el valor promedio del número de partículas y  $\Delta N^2$  deseado a través de:

$$\langle BCS | \hat{N} | BCS \rangle = 2 \sum_k v_k^2 \quad (\text{F.11})$$

$$\langle BCS | \Delta N^2 | BCS \rangle = 4 \sum_k u_k^2 v_k^2 \quad (\text{F.12})$$

Hay que resolver la terna de ecuaciones (F.10), (F.11) y (F.12) lo que supone un grupo de ecuaciones de tres ecuaciones acopladas con tres incógnitas. Desde el punto de vista numérico estas ecuaciones no presentan mucha dificultad y pueden resolver sin dificultad. Otra alternativa para construir los estados  $|BCS(\Delta N^2)\rangle$  y no tener que resolver el grupo de ecuaciones (F.10), (F.11) y (F.12), es resolver el par de ecuaciones (F.10) (F.11) con un valor fijo del parámetro  $\mu_2$ , y calcular en el estado resultante  $|BCS(\Delta N^2)\rangle$  el valor de  $\Delta N^2$  a posteriori. Esto se basa en la dependencia uno a uno que existe entre el parámetro  $\mu_2$  y el valor de  $\Delta N^2$ .

## F.2 Ligadura $\Delta N^2$ en el método proyectado

Ahora el hamiltoniano que tenemos que usar es:

$$H' = H - \mu \Delta N^2 \quad (\text{F.13})$$

Notemos que la ligadura que realizamos sobre el estado  $|BCS\rangle_N$  recae en el estado *intrínseco*  $|BCS\rangle$ , pues de otro modo no tendría sentido hacerlo sobre el estado proyectado.

La expresión para la energía es:

$$\langle BCS|H'|BCS\rangle_N = \langle BCS|H|BCS\rangle_N - \langle BCS|\Delta N^2|BCS\rangle \quad (\text{F.14})$$

El valor esperado de este Hamiltoniano es:

$$E' = E_P - 4\mu \sum_k u_k^2 v_k^2 \quad (\text{F.15})$$

cuya derivada tiene por expresión:

$$\begin{aligned} \delta E' &= 4v_k \left( (\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k) - \Delta_k \frac{u_k^2 - v_k^2}{u_k v_k} \right) - 4\mu \left( 2u_k^2 v_k - \frac{v_k}{u_k} 2u_k v_k^2 \right) \\ &= (\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k) - \Delta_k \frac{(u_k^2 - v_k^2)}{u_k v_k} - 2\mu (u_k^2 - v_k^2) u_k v_k = 0 \end{aligned} \quad (\text{F.16})$$

Hacemos el cambio de variable  $(u_k, v_k) \rightarrow \chi_k$

$$(\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k) \frac{\chi_k^{1/2}}{1 + \chi_k} - \Delta_k \frac{(\chi_k - 1)}{1 + \chi_k} - 2\mu \frac{\chi_k - 1}{(1 + \chi_k)^2} \chi_k^{1/2} = 0 \quad (\text{F.17})$$

$$\chi_k^{1/2} (1 + \chi_k) (\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k) - \Delta_k (\chi_k^2 - 1) - 2\mu \chi_k^{1/2} (\chi_k - 1) = 0 \quad (\text{F.18})$$

Hacemos  $x \rightarrow \chi_k$  y encontramos:

$$x(1 + x^2)(\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k) - \Delta_k (x^4 - 1) - 2\mu x(x^2 - 1) = 0 \quad (\text{F.19})$$

Que se convierte en:

$$x^4 - \frac{\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k - 2\mu}{\Delta_k} x^3 - \frac{\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k + 2\mu}{\Delta_k} x - 1 = 0 \quad (\text{F.20})$$

Esta ecuación es una ecuación de cuarto grado. Las soluciones coinciden con las raíces de las dos ecuaciones cuadráticas:

$$x^2 + \frac{(b+A)}{2} + \left( y + \frac{by-d}{A} \right) = 0 \quad (\text{F.21})$$

donde  $A$  puede tomar los dos valores  $A = \pm \sqrt{8y + b^2 - 4c}$  en la que  $y$  es una raíz real cualquiera de la ecuación cúbica:

$$8y^3 - 4cy^2 + (2bd - 8e)y + e(4c - b^2) - d^2 = 0 \quad (\text{F.22})$$

Los coeficientes  $ab, d$  corresponden a la ecuación de cuarto grado en su forma canónica  $x^4 + bx^3 + cx^2 + dx + e = 0$ . En nuestro caso los coeficientes están formados por:

$$b = -\frac{(\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k - 2\mu)}{\Delta_k}, \quad c = 0, \quad d = -\frac{(\hat{\epsilon}_k + \Lambda_k + 2\mu)}{\Delta_k} \quad e = -1 \quad (\text{F.23})$$

Para resolver la ecuación cúbica (F.22) la convertimos en

$$y^3 + 3py + 2q = 0 \quad (\text{F.24})$$

Con los coeficientes:

$$\begin{aligned} 2q &= \frac{2b'^3}{27(a')^3} - \frac{b'c'}{3(a')^2} + \frac{d'}{a'} \\ 3p &= \frac{3a'c' - b'^2}{3a'^2} \end{aligned} \quad (\text{F.25})$$

y las constantes  $a', b', c'$  y  $d'$  están dadas por:

$$a' = 8, \quad b' = -4c, \quad c' = 2bd - 8e, \quad d' = e(4c - b^2) - d^2 \quad (\text{F.26})$$

Obtener una solución real de la ecuación (F.24) es posible a partir del procedimiento de los valores auxiliares. Este procedimiento consiste en hacer  $r = \pm \sqrt{|p|}$ , donde el signo de  $r$  debe coincidir con el de  $q$ . Entonces el valor auxiliar  $\varphi$  junto con las raíces  $y_1, y_2, y_3$  se obtienen en relación con los signos de  $p$  y  $D = q^2 + p^3$  a partir de la tabla.

Una vez obtenida una raíz real, se puede resolver las dos ecuaciones cuadráticas (F.21), que a su vez, como dijimos más arriba coinciden con las soluciones de la ecuación de cuarto grado (F.20). De las soluciones aquí obtenidas hay que quedarse con aquella que es real  $x_R$

Finalmente hay que volver a las incógnitas originales  $\chi_k$  a través de  $\chi_k = x_r^2$ , y de aquí pasar a las amplitudes  $u_k, v_k$ .

## CÁLCULO DE LOS CORRELADORES $C_k^2$

En este apéndice calculamos las expresiones para los correladores  $C_k^2 = \langle c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle - \langle c_{k+}^\dagger c_{k+} \rangle \langle c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle$  para las distintas aproximaciones BCS, proyección PBCS, solución exacta de Richardson y el método de la coordenada generadora MCG.

### G.1 Cálculo en la teoría generalizada BCS

Empezamos calculando el término  $\langle c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle$  usando la función de onda BCS:

$$|BCS\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \quad (G.1)$$

$$\begin{aligned} \langle BCS | c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} | BCS \rangle &= \langle - | (c_{j+} c_{j-} v_j + u_j) \prod_j [c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-}] \prod_l (u_l + v_l c_{l+}^\dagger c_{l-}^\dagger) |-\rangle = \\ \langle - | (c_{j+} c_{j-} v_j + u_j) \prod_{j \neq k} \prod_{l \neq k} (u_l + v_l c_{l+}^\dagger c_{l-}^\dagger) (c_{k+} c_{k-} v_k + u_k) [c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-}] (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle &= \\ \langle - | (c_{k+} c_{k-} v_k + u_k) [c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-}] (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle &= \\ v_k^2 \langle - | c_{k+} c_{k-} [c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-}] c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger |-\rangle &= v_k^2 \end{aligned} \quad (G.2)$$

Pasemos ahora al segundo término  $\langle c_{k+}^\dagger c_{k+} \rangle \langle c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle BCS | c_{k+}^\dagger c_{k+} | BCS \rangle &= \langle - | (c_{j+} c_{j-} v_j + u_j) \prod_j [c_{k+}^\dagger c_{k+}] \prod_l (u_l + v_l c_{l+}^\dagger c_{l-}^\dagger) |-\rangle = \\ \langle - | (c_{j+} c_{j-} v_j + u_j) \prod_{j \neq k} \prod_{l \neq k} (u_l + v_l c_{l+}^\dagger c_{l-}^\dagger) (c_{k+} c_{k-} v_k + u_k) [c_{k+}^\dagger c_{k+}] (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle &= \\ \langle - | (c_{k+} c_{k-} v_k + u_k) [c_{k+}^\dagger c_{k+}] (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle &= v_k^2 \langle - | c_{k+} c_{k-} [c_{k+}^\dagger c_{k+}] c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger |-\rangle = v_k^2 \end{aligned} \quad (G.3)$$

El término  $\langle c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle$  resulta idéntico al anterior, de modo que:

$$\langle c_{k+}^\dagger c_{k+} \rangle \langle c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle = v_k^4 \quad (\text{G.4})$$

Juntando todo obtenemos:

$$C_k^2 = v_k^2 - v_k^4 \quad (\text{G.5})$$

## G.2 Cálculo en la teoría proyectada PBCS

Empezamos calculando el término  $\langle c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle$  usando la función de onda PBCS:

$$\begin{aligned} |BCS\rangle_N &= C \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i\phi \frac{N}{2}} \prod_k (u_k + e^{i\phi} v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle = \\ &= -i \oint \frac{dz}{2\pi} z^{-(n_0-1)} \prod_k (u_k + z v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \end{aligned} \quad (\text{G.6})$$

$$\begin{aligned} \langle BCS | c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} | BCS \rangle_N &= \frac{1}{4\pi^2} \oint dz' dz^* (z')^{-n_0-1} (z^*)^{-n_0-1} \times \\ &\quad \langle - | \prod_j (u_j + z^* c_{k+} c_{k-} v_j) [c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-}] \prod_l (u_l + z v_l c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) | - \rangle = \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \oint dz' dz^* (z')^{-n_0-1} (z^*)^{-n_0-1} \prod_{j \neq k} (u_j^2 + z' z^* v_j^2) \times \\ &\quad \langle - | (u_k + z^* v_k c_{k+} c_{k-}) [c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-}] (u_k + z' v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) | - \rangle = \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \oint dz' dz^* (z')^{-n_0-1} (z^*)^{-n_0-1} \prod_{j \neq k} (u_j^2 + z' z^* v_j^2) v_k^2 z^* z' = \\ &= \frac{-2\pi i}{4\pi^2} \oint dz z^{-n_0-1} \prod_{j \neq k} (u_j^2 + z v_j^2) v_k^2 z = v_k^2 \frac{R_1^k}{R_0^0} \end{aligned} \quad (\text{G.7})$$

El término  $\langle c_{k-}^\dagger c_{k-} \rangle$  se calcula idénticamente que el anterior, y se obtiene idéntico resultado:

$$\langle BCS | c_{k-}^\dagger c_{k-} | BCS \rangle_N = v_k^2 \frac{R_1^k}{R_0^0} \quad (\text{G.8})$$

Juntando todo obtenemos finalmente:

$$C_k^2 = v_k^2 \frac{R_1^k}{R_0^0} - v_k^4 \left( \frac{R_1^k}{R_0^0} \right)^2 \quad (\text{G.9})$$

### G.3 Cálculo en la solución exacta de Richardson

En la teoría desarrollada por Richardson los correladores quedan expresados por:

$$C_k^2 = \langle \Phi | c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} | \Phi \rangle - \langle \Phi | c_{k-}^\dagger c_{k-} | \Phi \rangle = n_k - n_k^2, \quad (\text{G.10})$$

donde  $n_k = \langle \Phi | c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} | \Phi \rangle$  es la probabilidad de ocupación de un par electrónico.

Richardson mostró en [] que los  $n_k$ 's necesarios para expresar los correladores pueden ser escritos como

$$n_k = \sum_{l=1}^{n_0} \frac{a_l}{(2\epsilon_k - e_k)^2} \quad (\text{G.11})$$

con  $a_i$  siendo la solución de un sistema de ecuaciones lineales de dimensión  $n_0 \times n_0$ :

$$\left[ \sum_j \frac{1}{(2\epsilon_j - e_k)^2} - 2 \sum_{l=1, l \neq k}^{n_0} \frac{1}{(e_l - e_k)^2} \right] a_k + 2 \sum_{l=1, l \neq k}^{n_0} \frac{a_l}{(e_l - e_k)^2} = 1 \quad (\text{G.12})$$

La solución del sistema lineal anterior es numéricamente trivial y los  $n_k$  pueden ser encontrados convenientemente por este método. De esta forma se obtienen los correladores  $C_k^2$ .

### G.4 Cálculo en el método de la coordenada generadora MCG

En el apartado de teoría dimos la expresión para encontrar el valor esperado de un operador, apliquemos ahora esta expresión para encontrar la expresión correspondiente de los  $C_k^2$ .

$$C_k^2 = \langle \Psi | c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} | \Psi \rangle - \langle \Psi | c_{k+}^\dagger c_{k+} | \Psi \rangle \langle \Psi | c_{k-}^\dagger c_{k-} | \Psi \rangle \quad (\text{G.13})$$

Usando la expresión (7.25) encontramos:

$$C_k^2 = \sum_k \sum_{k'} \frac{g_{k'}}{\sqrt{n_{k'}}} \frac{g_k}{\sqrt{n_k}} \int d\xi' d\xi U_{k'}^*(\xi') U_k(\xi) (Q_1)_{\xi\xi'} - \left( \sum_k \sum_{k'} \frac{g_{k'}}{\sqrt{n_{k'}}} \frac{g_k}{\sqrt{n_k}} \int d\xi' d\xi U_{k'}^*(\xi') U_k(\xi) (Q_2)_{\xi\xi'} \right) \left( \sum_k \sum_{k'} \frac{g_{k'}}{\sqrt{n_{k'}}} \frac{g_k}{\sqrt{n_k}} \int d\xi' d\xi U_{k'}^*(\xi') U_k(\xi) (Q_3)_{\xi\xi'} \right) \quad (\text{G.14})$$

donde los valores esperados  $Q_1$ ,  $Q_2$  y  $Q_3$  son:

$$(Q_1)_{\xi'\xi} = \langle BCS(\xi') | c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} | BCS(\xi) \rangle_N \quad (G.15)$$

$$(Q_2)_{\xi'\xi} = \langle BCS(\xi') | c_{k+}^\dagger c_{k+} | BCS(\xi) \rangle_N \quad (G.16)$$

$$(Q_3)_{\xi'\xi} = \langle BCS(\xi') | c_{k-}^\dagger c_{k-} | BCS(\xi) \rangle_N \quad (G.17)$$

Comencemos con  $(Q_1)_{\xi'\xi}$ ,

$$\begin{aligned} \langle BCS(\xi') | c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-} | BCS(\xi) \rangle_N &= \frac{1}{4\pi^2} \oint dz' dz^* (z')^{-n_0-1} (z^*)^{-n_0-1} \times \\ &\quad \langle - | \prod_j (u_j(\xi') + z^* c_{k+} c_{k-} v_j(\xi')) [c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-}] \prod_l (u_l(\xi) + z v_l(\xi) c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) | - \rangle = \\ &\quad \frac{1}{4\pi^2} \oint dz' dz^* (z')^{-n_0-1} (z^*)^{-n_0-1} \prod_{j \neq k} (u_j(\xi') u_j(\xi) + z' z^* v_j(\xi') v_j(\xi)) \times \\ &\quad \langle - | (u_k(\xi') + z^* v_k(\xi') c_{k+} c_{k-}) [c_{k+}^\dagger c_{k+} c_{k-}^\dagger c_{k-}] (u_k(\xi) + z' v_k(\xi) c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) | - \rangle = \\ &\quad \frac{1}{4\pi^2} \oint dz' dz^* (z')^{-n_0-1} (z^*)^{-n_0-1} \prod_{j \neq k} (u_j(\xi') u_j(\xi) + z' z^* v_j(\xi') v_j(\xi)) v_k(\xi') v_k(\xi) z^* z' = \\ &\quad \frac{-2\pi i}{4\pi^2} \oint dz z^{-n_0-1} \prod_{j \neq k} (u_k(\xi') u_k(\xi) + z v_k(\xi') v_k(\xi)) v_k(\xi') v_k(\xi) z = v_k(\xi') v_k(\xi) \frac{R_1^k(\xi', \xi)}{R_0^0(\xi', \xi)} \end{aligned} \quad (G.18)$$

De modo que:

$$(Q_1)_{\xi'\xi} = v_k(\xi') v_k(\xi) \frac{R_1^k(\xi', \xi)}{R_0^0(\xi', \xi)} \quad (G.19)$$

Para el segundo término  $(Q_2)_{\xi'\xi}$  el cálculo se realiza de la misma forma que el anterior:

$$(Q_2)_{\xi'\xi} = v_k(\xi') v_k(\xi) \frac{R_1^k(\xi', \xi)}{R_0^0(\xi', \xi)} \quad (G.20)$$

Para  $(Q_3)_{\xi'\xi}$  el resultado es idéntico al anterior:

$$(Q_3)_{\xi'\xi} = v_k(\xi') v_k(\xi) \frac{R_1^k(\xi', \xi)}{R_0^0(\xi', \xi)} \quad (G.21)$$

Llevando los valores  $Q_1, Q_2$  y  $Q_3$  a la expresión (G.14) obtenemos finalmente:

$$\begin{aligned} C_k^2 &= \sum_k \sum_{k'} \frac{g_{k'}}{\sqrt{n_{k'}}} \frac{g_k}{\sqrt{n_k}} \int d\xi' d\xi U_{k'}^*(\xi') U_k(\xi) \left( v_k(\xi') v_k(\xi) \frac{R_1^k(\xi', \xi)}{R_0^0(\xi', \xi)} \right) - \\ &\quad \left( \sum_k \sum_{k'} \frac{g_{k'}}{\sqrt{n_{k'}}} \frac{g_k}{\sqrt{n_k}} \int d\xi' d\xi U_{k'}^*(\xi') U_k(\xi) \left( v_k(\xi') v_k(\xi) \frac{R_1^k(\xi', \xi)}{R_0^0(\xi', \xi)} \right) \right)^2 \end{aligned} \quad (G.22)$$



# LA TEORÍA BCS EN LOS MODELOS DE RICHARDSON-GAUDIN

## H.1 Ecuaciones variacionales BCS

En esta sección damos los detalles de la derivación del conjunto de ecuaciones variacionales (10.56).

El hamiltoniano generalizado es:

$$H = \sum_i \hat{\epsilon}_i n_i + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 c_{i+}^\dagger c_{i-}^\dagger c_{j-} c_{j+} + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 n_i n_j \quad (\text{H.1})$$

Con  $n_i = c_{i+}^\dagger c_{i+} + c_{i-}^\dagger c_{i-}$ .

Calculamos el valor esperado del Hamiltoniano con la ligadura en el número de partículas  $H' = H - \mu N$  usando el estado BCS:

$$|BCS\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger) |-\rangle \quad (\text{H.2})$$

1) Término  $\sum_i \hat{\epsilon}_i n_i$

$$\langle BCS | \sum_i \hat{\epsilon}_i n_i | BCS \rangle = \sum_i \hat{\epsilon}_i \langle BCS | n_i | BCS \rangle = 2 \sum_i \hat{\epsilon}_i v_i^2 \quad (\text{H.3})$$

2) Término  $\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 c_{i+}^\dagger c_{i-}^\dagger c_{j-} c_{j+}$

$$\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 \langle BCS | c_{i+}^\dagger c_{i-}^\dagger c_{j-} c_{j+} | BCS \rangle = \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 u_i v_i u_j v_j \quad (\text{H.4})$$

3) Término  $\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 n_i n_j$

$$\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 \langle BCS | n_i n_j | BCS \rangle = 4 \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 v_i^2 v_j^2 \quad (\text{H.5})$$

Finalmente tenemos para la expresión de la energía  $E' = \langle BCS | H' | BCS \rangle$ :

$$E' = 2 \underbrace{\sum_i (\hat{\epsilon}_i - \mu) v_i^2}_{E'_1} + \underbrace{\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 u_i v_i u_j v_j}_{E'_2} + 4 \underbrace{\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 v_i^2 v_j^2}_{E'_3} \quad (H.6)$$

Para hallar las ecuaciones variaciones realizamos la minimización de la energía  $E'$ :

$$\delta_{v_k} E' = \left( \frac{\partial}{\partial v_k} - \frac{v_k}{u_k} \frac{\partial}{\partial u_k} \right) E' = 0 \quad (H.7)$$

Comencemos con el primer término de la derivada  $\frac{\partial E'}{\partial v_k}$ :

$$\frac{\partial E'}{\partial v_k} = \frac{\partial E'_1}{\partial v_k} + \frac{\partial E'_2}{\partial v_k} + \frac{\partial E'_3}{\partial v_k} \quad (H.8)$$

1) Término  $\frac{\partial E'_1}{\partial v_k}$

$$\frac{\partial E'_1}{\partial v_k} = 4 \sum_i (\hat{\epsilon}_i - \mu) v_i \delta_{ik} = 4 (\hat{\epsilon}_k - \mu) v_k \quad (H.9)$$

2) Término  $\frac{\partial E'_2}{\partial v_k}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E'_2}{\partial v_k} &= \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 (u_i u_j v_j \delta_{ik} + u_i v_i u_j \delta_{jk}) = \\ &= \sum_j V_{kj}^1 u_k u_j v_j + \sum_i V_{ik}^1 u_i v_i u_k = u_k \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ki}^1 + V_{ik}^1) u_i v_i \end{aligned} \quad (H.10)$$

3) Término  $\frac{\partial E'_3}{\partial v_k}$

$$\frac{\partial E'_3}{\partial v_k} = 4 \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 (2v_i v_j^2 \delta_{ik} + 2v_i^2 v_j \delta_{jk}) = 8v_k \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ik}^2 + V_{ki}^2) v_i^2 \quad (H.11)$$

Juntando todo tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E'}{\partial v_k} &= 4 (\hat{\epsilon}_k - \mu) v_k + u_k \sum_{i \neq k} (V_{ki}^1 + V_{ik}^1) u_i v_i + 8v_k \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ik}^2 + V_{ki}^2) v_i^2 = \\ &= 4v_k \left( \hat{\epsilon}_k - \mu + 2 \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ik}^2 + V_{ki}^2) v_i^2 \right) + u_k \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ki}^1 + V_{ik}^1) u_i v_i \end{aligned} \quad (H.12)$$

De la misma operamos para la derivada  $\frac{\partial E'}{\partial u_k}$ :

$$\frac{\partial E'}{\partial u_k} = \frac{\partial E'_1}{\partial u_k} + \frac{\partial E'_2}{\partial u_k} + \frac{\partial E'_3}{\partial u_k} \quad (\text{H.13})$$

1) Término  $\frac{\partial E'_1}{\partial u_k}$

$$\frac{\partial E'_1}{\partial u_k} = 0 \quad (\text{H.14})$$

2) Término  $\frac{\partial E'_2}{\partial u_k}$

$$\frac{\partial E'_2}{\partial u_k} = \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 (\delta_{ik} v_i u_j v_j + u_i v_i v_j \delta_{jk}) = v_k \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ki}^1 + V_{ik}^1) u_i v_i \quad (\text{H.15})$$

3) Término  $\frac{\partial E'_3}{\partial u_k}$

$$\frac{\partial E'_3}{\partial u_k} = 0 \quad (\text{H.16})$$

Finalmente juntando estos resultados en la expresión  $\delta_v E'$  tenemos:

$$\delta_v E' = 4v_k \left( \hat{\epsilon}_k - \mu + 2 \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ik}^2 + V_{ki}^2) v_i^2 \right) + u_k \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ki}^1 + V_{ik}^1) u_i v_i - \frac{v_k^2}{u_k} \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ki}^1 + V_{ik}^1) u_i v_i = 0 \quad (\text{H.17})$$

Multiplicando por  $u_k$  obtenemos:

$$4u_k v_k \left( \hat{\epsilon}_k - \mu + 2 \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ik}^2 + V_{ki}^2) v_i^2 \right) + u_k^2 \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ki}^1 + V_{ik}^1) u_i v_i - v_k^2 \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ki}^1 + V_{ik}^1) u_i v_i = 0 \quad (\text{H.18})$$

La cual se convierte en:

$$2(\tilde{\epsilon}_k - \mu) u_k v_k + \Delta_k (v_k^2 - u_k^2) = 0 \quad (\text{H.19})$$

donde:

$$\tilde{\epsilon}_k = \hat{\epsilon}_k + 2 \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ik}^2 + V_{ki}^2) v_i^2 \quad (\text{H.20})$$

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum_{i,k(i \neq k)} (V_{ik}^1 + V_{ki}^1) u_i v_i \quad (\text{H.21})$$

Como vemos estas ecuaciones tienen la misma forma que las ecuaciones BCS ordinarias correspondientes al Hamiltoniano de apareamiento reducido, de modo que la forma de resolverlas va en paralelo a aquella.

Como sabemos las soluciones  $u_k, v_k$  se escriben como:

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{(\tilde{\epsilon}_k - \mu)}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_k - \mu)^2 + \Delta_k^2}} \right) \quad u_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{(\tilde{\epsilon}_k - \mu)}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_k - \mu)^2 + \Delta_k^2}} \right) \quad (\text{H.22})$$

Escribamos en detalle la ecuación del gap y la que determina el número de partículas en promedio:

$$\Delta_k = -\frac{1}{4} \sum_{i, k(i \neq k)} (V_{ik}^1 + V_{ki}^1) \frac{\Delta_i}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_i - \mu)^2 + \Delta_i^2}} \quad (\text{H.23})$$

$$N = \sum_i \left( 1 - \frac{(\tilde{\epsilon}_i - \mu)}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_i - \mu)^2 + \Delta_i^2}} \right) \quad (\text{H.24})$$

Las ecuaciones (H.23) y (H.24) determinan las amplitudes  $u_k, v_k$ , en el apartado siguiente veremos la manera de resolverlas numéricamente.

## H.1.1. Solución numérica de las ecuaciones variacionales BCS

Como dijimos en la sección anterior hemos de resolver las ecuaciones (H.23), (H.24) obteniendo así el conjunto de parámetros de orden  $\Delta_k$  y el potencial químico  $\mu$ .

Creemos necesario dedicar algún comentario de como resolver eficientemente dichas ecuaciones. El primer paso es resolver las ecuaciones *simplificadas*, las cuales se obtienen de la siguiente sustitución  $\tilde{\epsilon}_k \rightarrow \hat{\epsilon}_k$ . Se comienza dando unos valores iniciales para  $\Delta_k$  y  $\mu$ . Con ese valor de  $\mu$  se resuelve iterativamente la ecuación (H.23) hasta que convergen los  $\Delta_k$ . Estos valores convergidos de  $\Delta_k$  son introducidos en la ecuación (H.24) y es resuelta para obtener un nuevo  $\mu$ . De nuevo se repite el ciclo con la ecuación (H.23). Cada ciclo se repite hasta que el valor de la energía ha convergido.

## Apéndice I

# EL MÉTODO PROYECTADO EN LOS MODELOS DE RICHARDSON-GAUDIN

### I.1 Ecuaciones variacionales PBCS

Busquemos las ecuaciones variacionales que han de satisfacer el conjunto de amplitudes  $u_k, v_k$  para minimizar la energía proyectada.

El hamiltoniano es

$$H = \sum_i \hat{\epsilon}_i n_i + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 c_{i+}^\dagger c_{i-}^\dagger c_{j-} c_{j+} + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 n_i n_j \quad (I.1)$$

Calculemos la energía proyectada:

$$E_P = \frac{\langle BCS | H | BCS \rangle_N}{\langle BCS | BCS \rangle_N} \quad (I.2)$$

La norma  $\langle BCS | BCS \rangle_N$  es la misma que en las secciones precedentes.....

1) Término  $\sum_i \hat{\epsilon}_i n_i$

$$\sum_i \hat{\epsilon}_i \frac{\langle BCS | n_i | BCS \rangle_N}{\langle BCS | BCS \rangle_N} = 2 \sum_i \hat{\epsilon}_i v_i^2 \frac{R_1^i}{R_0^0} \quad (I.3)$$

2) Término  $\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 c_{i+}^\dagger c_{i-}^\dagger c_{j-} c_{j+}$

$$\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 \frac{\langle BCS | c_{i+}^\dagger c_{i-}^\dagger c_{j-} c_{j+} | BCS \rangle_N}{\langle BCS | BCS \rangle_N} = \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 u_i v_i u_j v_j \frac{R_1^{ij}}{R_0^0} \quad (I.4)$$

3) Término  $\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 n_i n_j$

$$\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 = \frac{\langle BCS | n_i n_j | BCS \rangle_N}{\langle BCS | BCS \rangle_N} = 4 \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 v_i^2 v_j^2 \frac{R_2^{ij}}{R_0^0} \quad (I.5)$$

Juntando todos estos término encontramos para la energía proyectada:

$$E_P = \underbrace{2 \sum_i \hat{\epsilon}_i v_i^2 \frac{R_1^i}{R_0^0}}_{E_1} + \underbrace{\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 u_i v_i u_j v_j \frac{R_1^{ij}}{R_0^0}}_{E_2} + 4 \underbrace{\sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 v_i^2 v_j^2 \frac{R_2^{ij}}{R_0^0}}_{E_3} \quad (I.6)$$

Notemos la aparición de la integral de residuo de segundo orden  $R_2^{ij}$  en el último término  $E_3$ , esta integral no aparece en la expresión de la energía proyectada usando el Hamiltoniano de apareamiento generalizado.

Calculemos ahora la derivada de la energía proyectada para usar posteriormente el teorema de Ritz y encontrar las ecuaciones variacionales.

$$\delta_{v_k} E_P = \left( \frac{\partial}{\partial v_k} - \frac{v_k}{u_k} \frac{\partial}{\partial u_k} \right) E_P \quad (I.7)$$

Realicemos la derivada por separado cada término:

1)  $\delta_{v_k} E_1$

$$\begin{aligned} \delta_{v_k} \left( 2 \sum_i \hat{\epsilon}_i v_i^2 \frac{R_1^i}{R_0^0} \right) &= 2 \sum_i \hat{\epsilon}_i \left[ (\delta_{v_k} v_i^2) \frac{R_1^i}{R_0^0} + v_i^2 \delta_{v_k} \left( \frac{R_1^i}{R_0^0} \right) \right] = \\ &= 4 \sum_i \hat{\epsilon}_i v_i \delta_{ik} \frac{R_1^i}{R_0^0} + 4 v_k \sum_i \hat{\epsilon}_i v_i^2 \left( \frac{R_2^{ik} - R_1^{ik}}{R_0^0} - \frac{R_1^i R_1^k - R_0^0}{R_0^0} \right) \end{aligned} \quad (I.8)$$

2)  $\delta_{v_k} E_2$

$$\begin{aligned} \delta_{v_k} \left( \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 u_i v_i u_j v_j \frac{R_1^{ij}}{R_0^0} \right) &= \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 \delta_{v_k} (u_i v_i u_j v_j) \frac{R_1^{ij}}{R_0^0} + \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 u_i v_i u_j v_j \delta_{v_k} \left( \frac{R_1^{ij}}{R_0^0} \right) = \\ &= \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 \left( u_i u_j v_j \delta_{ik} - \frac{v_k}{u_k} v_i u_j v_j \delta_{ik} + u_i v_i u_j \delta_{jk} - \frac{v_k}{u_k} u_i v_i v_j \delta_{jk} \right) \frac{R_1^{ij}}{R_0^0} + \\ &= 2 v_k \sum_{ij(i \neq j)} V_{ij}^1 u_i v_i u_j v_j \left( \frac{R_2^{ijk} - R_1^{ijk}}{R_0^0} - \frac{R_1^{ij} R_1^k - R_0^0}{R_0^0} \right) = \\ &= u_k \sum_{j(j \neq k)} (V_{kj}^1 + V_{jk}^1) u_j v_j \frac{R_1^{jk}}{R_0^0} - \frac{v_k^2}{u_k} \sum_{j(j \neq k)} (V_{jk}^1 + V_{kj}^1) u_j v_j \frac{R_1^{jk}}{R_0^0} + \\ &= 2 v_k \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^1 u_i v_i u_j v_j \left[ \frac{R_2^{ijk}}{R_0^0} - \frac{R_1^{ij} R_1^k - R_0^0}{R_0^0} \right] \end{aligned} \quad (I.9)$$

3)  $\delta_{v_k} E_3$

$$\begin{aligned} \delta_{v_k} E_3 &= 4 \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 \left[ \delta_{v_k} \left( v_i^2 v_j^2 \right) \frac{R_2^{ij}}{R_0^0} + v_i^2 v_j^2 \delta_{v_k} \left( \frac{R_2^{ij}}{R_0^0} \right) \right] = \\ &= 4 \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 \left( 2v_i v_j^2 \delta_{ik} + 2v_j v_i^2 \delta_{jk} \right) \frac{R_2^{ij}}{R_0^0} + 8v_k \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 v_i^2 v_j^2 \left( \frac{R_3^{ijk} - R_2^{ijk}}{R_0^0} - \frac{R_2^{ij} R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) = \\ &= 16v_k \sum_{i,k(i \neq k)} V_{ik}^2 v_i^2 \frac{R_2^{ik}}{R_0^0} + 8v_k \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 v_i^2 v_j^2 \left( \frac{R_3^{ijk} - R_2^{ijk}}{R_0^0} - \frac{R_2^{ij} R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) \end{aligned} \quad (I.10)$$

Juntando todas las derivadas e igualando a cero:

$$\delta_{v_k} E_P = \delta_{v_k} E_1 + \delta_{v_k} E_2 + \delta_{v_k} E_3 = 0 \quad (I.11)$$

$$\begin{aligned} \delta_{v_k} E_P &= \hat{\epsilon}_k \frac{R_1^k}{R_0^0} + 4 \sum_{i(i \neq k)} V_{ik}^2 v_i^2 \frac{R_2^{ik}}{R_0^0} + \sum_{i(i \neq k)} \hat{\epsilon}_i v_i^2 \left( \frac{R_2^{ik} - R_1^{ik}}{R_0^0} - \frac{R_1^i R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) + \\ &+ \sum_{i,j(i \neq j)} \frac{V_{ij}^1}{2} u_i v_i u_j v_j \left( \frac{R_2^{ijk} - R_1^{ijk}}{R_0^0} - \frac{R_1^i R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) + 2 \sum_{i,j(i \neq j)} V_{ij}^2 v_i^2 v_j^2 \left( \frac{R_3^{ijk} - R_2^{ijk}}{R_0^0} - \frac{R_2^{ij} R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) + \\ &+ \left( \frac{u_k^2 - v_k^2}{u_k v_k} \right) \sum_{j(j \neq k)} V_{jk}^1 u_j v_j \frac{R_1^{jk}}{R_0^0} = 0 \end{aligned} \quad (I.12)$$

Que puede escribirse en la forma más compacta:

$$(\tilde{\epsilon}_k + \Gamma_k + \Lambda_k) u_k v_k + \Delta_k (v_k^2 - u_k^2) = 0 \quad (I.13)$$

Donde,

$$\tilde{\epsilon}_k = \hat{\epsilon}_k \frac{R_1^k}{R_0^0} \quad (I.14)$$

$$\Gamma_k = 4 \sum_{i,k(i \neq k)} V_{ik}^2 v_i^2 \frac{R_2^{ik}}{R_0^0} \quad (I.15)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_k &= \sum_{i(i \neq k)} \hat{\epsilon}_i v_i^2 \left( \frac{R_2^{ik} - R_1^{ik}}{R_0^0} - \frac{R_1^i R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) + \\ &+ \sum_{i,j(i \neq j, \neq k)} \frac{V_{ij}^1}{2} u_i v_i u_j v_j \left( \frac{R_2^{ijk} - R_1^{ijk}}{R_0^0} - \frac{R_1^i R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) + \\ &+ 2 \sum_{i,j(i \neq j \neq k)} V_{ij}^2 v_i^2 v_j^2 \left( \frac{R_3^{ijk} - R_2^{ijk}}{R_0^0} - \frac{R_2^{ij} R_1^k - R_0^k}{R_0^0} \right) \end{aligned} \quad (I.16)$$

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum_{i(i \neq k)} V_{ik}^1 u_i v_i \frac{R_1^{ik}}{R_0^0} \quad (I.17)$$

La energía en función de los campos se puede escribir de la forma:

$$E_P = 2 \left[ \sum_i \left( \tilde{\epsilon}_i + \frac{\Gamma_i}{2} \right) v_i^2 - \sum_i u_i v_i \Delta_i \right] \quad (\text{I.18})$$

## 1.2 Solución numérica a las ecuaciones variacionales PBCS

Al igual que en el caso del Hamiltoniano de apareamiento reducido, las ecuaciones (I.13) pueden resolverse con un cambio apropiado de variables. En este caso el cambio de variables es exactamente el mismo que introdujimos para el caso con el Hamiltoniano reducido, a saber:

$$u_k^2 = \frac{\chi_k}{1 + \chi_k}; \quad v_k^2 = \frac{1}{1 + \chi_k} \quad (\text{I.19})$$

Con esta transformación las ecuaciones variacionales (I.13) adoptan la forma:

$$(\tilde{\epsilon}_k + \Gamma_k + \Lambda_k) \chi_k^{1/2} - \Delta_k (\chi_k - 1) = 0 \quad (\text{I.20})$$

Es necesarios una transformación adicional para poder resolver las ecuaciones:

$$\chi_k = \exp \theta_k \quad (\text{I.21})$$

Con la nueva variable  $\chi_k$  es posible escribir enteramente la solución en términos de ella:

$$\theta_k = 2 \operatorname{senh}^{-1} \left( \frac{\hat{\epsilon}_k + \Gamma_k + \Lambda_k}{2\Delta_k} \right) \quad (\text{I.22})$$

## 1.3 Cálculo de los campos $\hat{\epsilon}_k, \Lambda_k, \Gamma_k, \Delta_k$

Al igual que hicimos en el caso de las ecuaciones variacionales para el hamiltoniano de apareamiento reducido, es posible calcular las integrales de residuo  $R$ 's de una forma rápida y eficiente. Recordemos aquí cuál es la base de tales cálculos.

Es necesario calcular las integrales  $R_0^0$  y  $R_0^j$  mediante las rutinas de la transformada rápida de Fourier (ver apéndice C). A partir de éstas todas las demás pueden ser calculadas a partir de aquellas. Daremos las identidades que son necesarias para calcular todas las integrales que aparecen en los campos, que son las siguientes:  $R_1^k, R_1^{jk}, R_2^{jk}$ . Y las siguientes diferencias de integrales:  $R_2^{jk} - R_1^{jk}, R_2^{ijk} - R_1^{ijk}, R_3^{ijk} - R_2^{ijk}$



La integral  $R_1^k$  se obtiene usando la relación de Dietrich [DMP64]:

$$R_1^k = \frac{R_0^0 - u_k^2 R_0^k}{v_k^2} \quad (\text{I.23})$$

Para la integral  $R_1^{jk}$  hay que usar la identidad de Ma y Rasmussen [MR77] llegando a:

$$R_1^{jk} = \frac{s_j v_j^2 R_0^j - s_k v_k^2 R_0^k}{v_k^2 - v_j^2} \quad \text{con} \quad s_j = \frac{1}{v_j^2} - 1 \quad (\text{I.24})$$

De nuevo es necesario usar la relación de Ma's para la integral  $R_2^{jk}$ , obteniendo:

$$R_2^{jk} = (1 + s_j)(1 + s_k) \left\{ 1 + \frac{1}{s_k - s_j} \left( \frac{s_j^2}{1 + s_j} R_0^j - \frac{s_k^2}{1 + s_k} R_0^k \right) \right\} \quad (\text{I.25})$$

Para obtener  $R_2^{ik} - R_1^{ik}$  basta restar las dos igualdades anteriores para obtener:

$$R_2^{ik} - R_1^{ik} = \frac{R_0^0}{v_i^2 v_k^2} - \frac{R_0^i (v_i^2 - 1)}{v_i^2 (v_i^2 - v_k^2)} + \frac{R_0^k (v_k^2 - 1)}{v_k^2 (v_i^2 - v_k^2)} \quad (\text{I.26})$$

Exactamente igual para la diferencia  $R_2^{jk} - R_1^{jk}$ :

$$R_2^{jk} - R_1^{jk} = \frac{u_i^4 + u_i^2 v_i^2 R_0^i}{(v_i^2 - v_j^2)(v_i^2 - v_k^2)} + \frac{u_j^4 + u_j^2 v_j^2 R_0^j}{(v_j^2 - v_i^2)(v_j^2 - v_k^2)} + \frac{u_k^4 + u_k^2 v_k^2 R_0^k}{(v_k^2 - v_i^2)(v_k^2 - v_j^2)} \quad (\text{I.27})$$

Por último la diferencia  $R_3^{ijk} - R_2^{ijk}$  no es distinta a las anteriores:

$$R_3^{ijk} - R_2^{ijk} = \frac{1}{v_i^2 v_j^2 v_k^2} - \frac{u_i^4 (1 + u_i^2 v_i^2)}{v_i^2 (v_i^2 - v_j^2)(v_i^2 - v_k^2)} R_0^i - \frac{u_j^4 (1 + u_j^2 v_j^2)}{v_j^2 (v_j^2 - v_i^2)(v_j^2 - v_k^2)} R_0^j - \frac{u_k^2 (1 + u_k^2 v_k^2)}{v_k^2 (v_k^2 - v_i^2)(v_k^2 - v_j^2)} R_0^k \quad (\text{I.28})$$



## EL MÉTODO DE LA COORDENADA GENERADORA EN LOS MODELOS DE RICHARDSON-GAUDIN

### J.1 Solapes de la norma y el Hamiltoniano

Demos la fórmulas para los solapes de la norma  $\mathcal{N}_{\xi, \xi'}$  y del Hamiltoniano  $\mathcal{H}_{\xi, \xi'}$  usando el Hamiltoniano generalizado de apareamiento:

$$H = \sum_i \hat{\epsilon}_i n_i + \sum_{i, j (i \neq j)} V_{ij}^1 c_{i+}^\dagger c_{i-}^\dagger c_{j-} c_{j+} + \sum_{i, j (i \neq j)} V_{ij}^2 n_i n_j \quad (\text{J.1})$$

Los estados generadores  $|\Psi(\xi)\rangle$  son de nuevo las funciones proyectadas  $|BCS(\xi)\rangle_N$ .

Las expresiones para la norma y el solape del Hamiltoniano están expresadas en función de las integrales de residuo generalizadas  $R_m^{j_1, \dots, j_M}(\xi, \xi')$  cuya forma viene dada por:

$$R_m^{j_1, \dots, j_M}(\xi, \xi') = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i(n_0 - n)\phi} \prod_{k \neq j_1, \dots, j_M} (u_k(\xi) u_k(\xi') + e^{i\phi} v_k(\xi) v_k(\xi')) \quad (\text{J.2})$$

Para el solape de la norma no hay que calcular nada nuevo, pues depende exclusivamente de la estructura de los estados. Como vimos esta expresión tiene la expresión:

$$\mathcal{N}_{\xi \xi'} = R_0^0(\xi, \xi') \quad (\text{J.3})$$

El solape del Hamiltoniano tiene por expresión:

$$\mathcal{H}_{\xi \xi'} = 2 \sum_i \hat{\epsilon}_i v_i(\xi) v_i(\xi') R_1^i(\xi, \xi') + \sum_{i, j (i \neq j)} V_{ij}^1 u_i(\xi) v_i(\xi') u_j(\xi) v_j(\xi') R_1^{ij}(\xi, \xi') + 4 \sum_{i, j (i \neq j)} V_{ij}^2 v_i(\xi) v_i(\xi') v_j(\xi) v_j(\xi') R_2^{ij}(\xi, \xi') \quad (\text{J.4})$$



## REFERENCIAS

- [AA97] O. Agam and I. L. Aleiner. *Phys. Rev. B*, 56:5759, 1997.
- [ADGR03] J. M. Arias, J. Dukelsky, and J.E. Garcia-Ramos. Quantum phase transitions in the interacting boson model: Integrability, level repulsion, and level crossing. *Phys. Rev. Lett.*, 91 (16):162502, 2003.
- [Aga99] O. Agam. *Supersymmetry and Trace Formulae: Chaos and Disorder*, volume 108. Plenum Press, 1999.
- [And58] P. W. Anderson. Random-phase approximation in the theory of the superconductivity. *Phys. Rev.*, 112:1900, 1958.
- [And59] P. W. Anderson. Theory of dirty superconductors. *J. Phys. Chem. Solids*, 11:28, 1959.
- [AWA<sup>+</sup>97] O. Agam, N. S. Wingreen, B. L. Altshuler, D. C. Ralph, and M. Tinkham. *Phys. Rev. Lett.*, 78:1956, 1997.
- [BBBM75] R. Beck, J. Borysowicz, D. M. Brink, and M. V. Mihailovic. *Nucl. Phys. A*, 45:399, 1975.
- [BCS57] J. Bardeen, L.Ñ. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 108:1175–1204, 1957.
- [Bet31] H. A. Bethe. *Z. Phys.*, 71:265, 1931.
- [BFV] R. Balian, H. Flocard, and M. Veneroni. Extended bcs theories. *nucl-th/9706041*.
- [BFV99] R. Balian, H. Flocard, and M. Veneroni. *Phys. Rep.*, 317:251, 1999.
- [BH98] S. D. Berger and B. I. Halperin. *Phys. Rev. B*, 58:5213, 1998.
- [Bro65] C. G. Broyden. *Mathematics of Computation*, 19:577, 1965.
- [BRT96] C. T. Black, D. C. Ralph, and M. Tinkham. Spectroscopy of the superconducting gap in individual nanometer-scale aluminium particles. *Phys. Rev. Lett.*, 76:688, 1996.
- [BvD98] F. Braun and J. von Delft. Fixed- $n$  superconductivity: The crossover from the bulk to the few-electron limit. *Phys. Rev. Lett.*, 81:4712, 1998.
- [BvD99a] F. Braun and J. von Delft. *Phys. Rep.*, 59:9527, 1999.

- [BvD99b] F. Braun and J. von Delft. Superconductivity in ultrasmall metallic grains. *Phys. Rev. B*, 59:9527, 1999.
- [BvDRT97] F. Braun, J. von Delft, D. C. Ralph, and M. Tinkham. Paramagnetic breakdown of superconductivity in ultrasmall metallic grains. *Phys. Rev. Lett.*, 79:921, 1997.
- [BW68] D. M. Brink and A. Weiguny. *Nucl. Phys. A*, 59:399, 1968.
- [Cal62] F. Calogero. *J. Math. Phys.*, 10:2191, 1962.
- [CMS59] L.Ñ. Cooper, R. L. Mills, and A. M. Sessler. *Phys. Rev.*, 114:1377, 1959.
- [CRS97] M. C. Cambiaggio, A. M. F. Rivas, and M. Saraceno. Integrability of the pairing hamiltonian. *Nucl. Phys. A*, 624:157, 1997.
- [DDEP04] J. Dukelsky, G. G. Dussel, C. Esebbag, and S. Pittel. Exactly solvable models for atom-molecule hamiltonians. *Phys. Rev. Lett.*, 93 (5):050403, 2004.
- [DDP04] J. Dukelsky, G.G. Dussel, and S. Pittel. Exactly solvable models for trapped boson systems. *Opt. comm.*, 243 (1-6):131–143, 2004.
- [DES01] J. Dukelsky, C. Esebbag, and P. Schuck. Class of exactly solvable pairing models. *Phys. Rev. Lett.*, 87:066403, 2001.
- [DFC<sup>+</sup>98] R. Desmicht, G. Faini, V. Cros, A. Fert, F. Petroff, and A. Vaurés. *Appl. Phys. Lett.*, 72:386, 1998.
- [DGI<sup>+</sup>06] J. Dukelsky, V. G. Gueorguiev, P. Van Isacker, S. Dimitrova, B. Errea, and S. Lerma. Exact solution of the isovector neutron-proton pairing hamiltonian. *Phys. Rev. Lett.*, 96 (7):072503, 2006.
- [DMP64] K. Dietrich, H. J. Mang, and J. H. Pradal. Conservation of particle number in the nuclear pairing model. *Phys. Rev.*, 135(1B): B22, 1964.
- [DS99] J. Dukelsky and G. Sierra. Density matrix renormalization group study of ultrasmall superconducting grains. *Phys. Rev. Lett.*, 83:172, 1999.
- [DS00] J. Dukelsky and G. Sierra. Crossover from bulk to few-electron limit in ultrasmall metallic grains. *Phys. Rev. B*, 61:12302, 2000.
- [DT99a] D. Davidovic and M. Tinkham. *Phys. Rev. Lett.*, 83:1644, 1999.
- [DT99b] D. Davidovic and M. Tinkham. *cond-mat/9910396*, 1999.
- [Ell8a] J. P. Elliott. Collective motion in the nuclear shell model.1. classification schemes for states of mixed configurations. *Proc. R. Soc. London*, A 242:128, 1958a.
- [Ell8b] J. P. Elliott. Collective motion in the nuclear shell model.2. the introduction of intrinsic wave-functions. *Proc. R. Soc. London*, A 242:562, 1958b.
- [ES60] V. J. Emery and A. M. Sessler. *Phys. Rev.*, 119:248, 1960.

- 
- [FE03] M. A. Fernandez and J. L. Egido. Generalized bcs ansatz for pairing correlations in superconducting grains. *Phys. Rev. B*, 68:184505, 2003.
- [Fli72] T. Fliessbach. *Nucl. Phys. A*, 194:399, 1972.
- [Gau76] M. Gaudin. Diagonalization of a class of spin hamiltonians. *J. Phys. (Paris)*, 37(10):1087, 1976.
- [GBM68] J. W. Garland, K. H. Bennemann, and F. M. Mueller. Effect of lattice disorder on the superconducting transition temperature. *Phys. Rev. Lett.*, 21:1315, 1968.
- [GDMR99] S. Guerón, M. M. Deshmukh, E. B. Myers, and D. C. Ralph. *Phys. Rev. Lett.*, 83:4148, 1999.
- [GN66] J. F. Goodfellow and Y. Nōgami. On the superconductivity approximation for the nuclear pairing interaction. *Can. J. Phys.*, 44:1321, 1966.
- [Gri57] J. J. Griffin. Oxygen-16 by the method of generator coordinates. *Phys. Rev.*, 108:328, 1957.
- [GW57] J. J. Griffin and J.A. Wheeler. Collective motions in nuclei by the method of generator coordinates. *Phys. Rev.*, 108:311, 1957.
- [GZ68] I. Giaver and H. R. Zeller. Superconductivity of small tin particles measured by tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, 20:1504, 1968.
- [HB00] K. Hagino and G. F. Bertsch. *Nucl. Phys. A*, 679:163, 2000.
- [HMDS02] J. G. Hirsch, A. Mariano, J. Dukelsky, and P. Shuck. Fully self-consistent rpa description of the many level pairing model. *Ann. of Phys.*, 296:187, 2002.
- [HRB02] K. Hagino, P.-G. Reinhard, and G. F. Bertsch. *Phys. Rev. C*, 65:064320, 2002.
- [HW53] D. L. Hill and J. A. Wheeler. Nuclear constitution and the interpretation of fission phenomena. *Phys. Rev.*, 89:1102, 1953.
- [Ia80] F. Iachello and A. arima. *The interacting boson model*. Cambridge University, Cambridge, England, 1980.
- [JS64] B. Jancovici and D. H. Schiff. *Nucl. Phys.*, 58:308, 1964.
- [Kam68] A. Kamlah. *Z. Phys.*, 216:424, 1968.
- [Kaw80] A. Kawabata. Superconductivity of small metal particles i. *J. Low Temp. Phys.*, 38(1/2):191, 1980.
- [Kaw81] A. Kawabata. Superconductivity of small metal particles. *Surf. Sci.*, 106:358, 1981.
- [KLS61] A. Kerman, R. Lawson, and R. A. Sorensen. *Phys. Rev.*, 124:162, 1961.
- [LFH+00] A. Di Lorenzo, R. Fazio, F. W. Hekking, G. Falci, A. Mastellone, and G. Giaquinta. *Phys. Rev. Lett.*, 84:550, 2000.
-

- [Lip60] H. J. Lipkin. Collective motion in many-particle systems, part 1. *Ann. Phys. (NY)*, 9:272, 1960.
- [Lut63] J. M. Luttinger. An exactly soluble model of a many-fermion system. *J. Math. Phys.*, 15:609, 1963.
- [May50] M. Mayer. *Phys. Rev.*, 78:22, 1950.
- [MFF98] A. Mastellone, G. Falci, and R. Fazio. Small superconducting grain in the canonical ensemble. *Phys. Rev. Lett.*, 80:4542, 1998.
- [Mig60] A. Migdal. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 37:249, 1960.
- [ML97] K. A. Matveev and A. I. Larkin. Parity effect in ground state energies of ultrasmall superconducting grains. *Phys. Rev. Lett.*, 78:3749, 1997.
- [MR77] Chin W. Ma and John O. Rasmussen. Microscopic calculations of high-spin rotational states. *Phys. Rev. C*, 16, 1977.
- [MS93] A. C. Mueller and B. M. Sherril. *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.*, 43:529, 1993.
- [MSD72] B. Muhlschlegel, D. J. Scalapino, and R. Denton. Thermodynamic properties of small superconducting particles. *Phys. Rev. B*, 6(5):1767, 1972.
- [MTF70] R. Meservey, P. M. Tedrow, and P. Fulde. Magnetic field splitting of the quasiparticle states in superconducting transition temperature. *Phys. Rev. Lett.*, 25:1270, 1970.
- [Muh62] B. Muhlschlegel. Asymptotic expansion of the bcs partition function by means of the fundamental method. *J. Math. Phys.*, 3:522, 1962.
- [Nog64] Y. Nōgami. Improved superconductivity approximation for the pairing interaction in nuclei. *Phys. Rev.*, 134(2B):313, 1964.
- [Nog65] Y. Nōgami. On the superconductivity theory of the nuclear pairing interaction. *Phys. Lett.*, 15:335, 1965.
- [NZ64] Y. Nōgami and I. J. Zucker. A note on the pairing interaction in nuclei. *Nucl. Phys.*, 60:203, 1964.
- [PT62] R. E. Peierls and D. J. Thouless. *Nuc. Phys.*, 58:154, 1962.
- [PTVF92] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*, volume second edition. Cambridge University Press (Cambridge, UK), 1992.
- [Rac42] G. Racah. *Phys. Rev.*, 62:438, 1942.
- [RBT95] D. C. Ralph, C. T. Black, and M. Tinkham. Spectroscopic measurements of discrete electronic states in single metal particle. *Phys. Rev. Lett.*, 74:3241, 1995.
- [RBT96] D. C. Ralph, C. T. Black, and M. Tinkham. Studies of electron energy levels in single metal particles. *Physica (Amsterdam)*, 218B:258, 1996.



- 
- [RBT97] D. C. Ralph, C. T. Black, and M. Tinkham. Gate-voltage studies of discrete electronic states in aluminum nanoparticles. *Phys. Rev. Lett.*, 78:4087, 1997.
- [RCE01] R. Rossignoli, N. Canosa, and J. L. Egido. Pair transfer spectral function at finite temperature in nanometer-scale superconducting grains. *Phys. Rev. B*, 64:224511, 2001.
- [RCR98] R. Rossignoli, N. Canosa, and P. Ring. Parity effect in ground state energies of ultrasmall superconducting grains. *Phys. Rev. Lett.*, 80:1853, 1998.
- [RCR99] R. Rossignoli, N. Canosa, and P. Ring. Parity effect in ground state energies of ultrasmall superconducting grains. *Ann. Phys. (NY)*, 275:1, 1999.
- [Ric65] R. W. Richardson. Exact eigenstates of the pairing hamiltonian.ii. *J. Math. Phys.*, 6:1034, 1965.
- [Ric66] R. W. Richardson. Numerical study of the 8-32 particle eigenstates of the pairing hamiltonian. *Phys. Rev.*, 141:949, 1966.
- [Ric77] R. W. Richardson. Pairing in the limit of a large number of particles. *J. Math. Phys.*, 18:1802, 1977.
- [Rii94] K. Riisager. *Rev. Mod. Phys.*, 66:1105, 1994.
- [RS64] R. W. Richardson and N. Sherman. Exact eigenstates of the pairing-force hamiltonian. *Nucl. Phys.*, 52:221, 1964.
- [RS80] P. Ring and P. Schuck. *The Nuclear Many Body Problem*. Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [RZC99] R. Rossignoli, J. P. Zagorodny, and N. Canosa. Parity effect in ground state energies of ultrasmall superconducting grains. *Phys. Lett. A*, 258:188, 1999.
- [SA96] R. A. Smith and V. Ambegaokar. Effect of level statistics on superconductivity in ultrasmall metallic grains. *Phys. Rev. Lett.*, 77:4962, 1996.
- [SDD<sup>+</sup>00] G. Sierra, J. Dukelsky, G. G. Dussel, J. von Delft, and F. Braun. *Phys. Rev. B*, 61:11890, 2000.
- [SGR<sup>+</sup>99] D. G. Salinas, S. Guéron, D. C. Ralph, C. T. Black, and M. Tinkham. *Phys. Rev. B*, 60:6137, 1999.
- [Sol61] V. G. Soloviev. Effect of pairing correlation on energies and  $\beta$ -transition probabilities in deformed nuclei. *Mat. Fys. Skrif. Kong. Dan. Vid. Selsk.*, 1:1, 1961.
- [STKC70a] M. Strongin, R. S. Thompson, O. F. Kammerer, and J. E. Crow. Destruction of superconductivity in disordered near-monolayer films. *Phys. Rev. B*, 1:1078, 1970.
- [STKC70b] M. Strongin, R. S. Thompson, O. F. Kammerer, and J. E. Crow. Destruction of superconductivity in disordered near-monolayer films. *Phys. Rev. B*, 1(3):1078, 1970.
-

- [Sut71] B. Sutherland. Quantum many-body problem in one dimension-ground state. *J. Math. Phys.*, 12:246, 1971.
- [SvDIL] M. Schechter, J. von Delft, Y. Imry, and Y. Levinson. Two pairing parameters in superconducting grains. *Phys. Rev. B*.
- [TM] K. Tanaka and F. Marsiglio. Canonical bcs approximation for the attractive hubbard model. *Phys. Rev. B*.
- [Tom50] S. Tomonoga. Remarks on blochs method of sound waves applied to many-fermion problems. *Prog. Theor. Phys.*, 5:544, 1950.
- [TT98] G. S. Tian and L. H. Tang. *Phys. Rev. B*, 58:12333, 1998.
- [vD01] J. von Delft. Superconductivity in ultrasmall metallic grains. *Ann. Phys.*, 10:1–60, 2001.
- [vDZGT96] J. von Delft, A. D. Zaikin, D. S. Golubev, and W. Tichy. Parity-affected superconductivity in ultrasmall metallic grains. *Phys. Rev. Lett.*, 77:3189, 1996.
- [Vil75] F. Villars. *Proceedings of the international conference on nuclear selfconsistent fields*. North Holland, Amsterdam, 1975.
- [Whi92] S. R. White. Density-matrix formulation for quantum renormalization-groups. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2863, 1992.
- [WM66] K. Wildermuth and W. McClure. *Springer tracts in Modern Physics*, volume 108. Springer-Verlag, Berlin, 1966.
- [Won70] C. W. Wong. *Nucl. Phys. A*, 147:403, 1970.
- [ZLMG02] H.-Q. Zhou, J. Links, R. H. MacKenzie, and M. Gould. Superconducting correlations in metallic nanoparticles: Exact solution of the bcs model by algebraic bethe ansatz. *Phys. Rev. B*, 65:060502, 2002.