

Superconductividad IV

Prof. Alberto Camjayi

Introducción

Hamiltoniano efectivo (1957)

En el año 1957, Bardeen, Schrieffer y Cooper presentaron el hamiltoniano efectivo que explicaría la física de los superconductores “convencionales”.

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}$$

donde $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F$ y

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -v_0/V & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}|, |\xi_{\mathbf{k}'}| < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{si no.} \end{cases}$$

Campo medio

Hamiltoniano BCS (1957)

Incluso esta versión simplificada es imposible de resolver exactamente. BCS encontraron una solución de campo medio.

$$\begin{aligned} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} &\approx \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} + \\ &+ \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle + \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \end{aligned}$$

A diferencia de los casos conocidos de Hartree-Fock o Stoner, donde el valor medio es una densidad electrónica, en este caso BCS eligieron una “*densidad de pares*” para explicar la fenomenología observada.

Campo medio

Hamiltoniano BCS (1957)

Definiendo la función del gap

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^* \langle \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle \quad \Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle$$

Se obtiene

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle$$

Campo medio

Hamiltoniano BCS (1957)

El hamiltoniano de campo medio no conmuta con el operador número de electrones y, por lo tanto, para obtener resultados termodinámicos deberemos trabajar en el gran canónico.

Recuerden que el estado fundamental encontrado por Schrieffer tenía la misma propiedad.

Más allá de esto, el hamiltoniano obtenido es de una partícula y por lo tanto puede ser formalmente diagonalizado.

Bogoliubov-Valatin

Transformación de Bogoliubov

Vamos a diagonalizar el hamiltoniano por medio de la transformación canónica:

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

Pidiendo que estos nuevos operadores fermiónicos (“*bogoliubones*”) verifiquen las relaciones de conmutación

$$\left\{ \gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \right\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \implies |u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \quad \forall \mathbf{k}$$

Bogoliubov-Valatin

Transformación de Bogoliubov

Usando esta normalización, la relación inversa es

$$\begin{pmatrix} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$$

Ahora solo resta reemplazar las expresiones de los operadores originales en función de los nuevos en el hamiltoniano.

Luego de hacerlo, podremos determinar las funciones $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ pidiendo que los términos en $\gamma\gamma$ y $\gamma^\dagger\gamma^\dagger$ se anulen idénticamente.

Bogoliubov-Valatin

Transformación de Bogoliubov

Podemos determinar las funciones $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ pidiendo que los términos en $\gamma\gamma$ y $\gamma^\dagger\gamma^\dagger$ se anulen idénticamente.

La condición es

$$2\xi_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} - \Delta_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}^2 = 0$$

Resolviendo para $v_{\mathbf{k}}/u_{\mathbf{k}}$:

$$\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = \frac{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} - \xi_{\mathbf{k}}}{\Delta_{\mathbf{k}}^*}.$$

Sin perder generalidad, podemos suponer $u_{\mathbf{k}} \in \mathbb{R}$ de manera tal que las fases de $v_{\mathbf{k}}$ y $\Delta_{\mathbf{k}}$ sean idénticas.

Bogoliubov-Valatin

Transformación de Bogoliubov

Esta relación, junto a la de normalización

$$\frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} = \frac{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} - \xi_{\mathbf{k}}}{\Delta_{\mathbf{k}}^*} \text{ y } |u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1,$$

finalmente nos permiten despejar ambas funciones:

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{1 + \left| \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \right|^2} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \right)$$

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \right)$$

Campo medio

Hamiltoniano en campo medio

Con las funciones determinadas es posible escribir el hamiltoniano en su forma diagonal empleando los operadores de Bogoliubov.

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}\sigma} + E_0,$$

con $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$ las energías de excitación y

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle \right)$$

la energía del fundamental.

Campo medio

Autoconsistencia

Aún resta determinar la función del gap, de manera autoconsistente:

$$\begin{aligned}\Delta_{\mathbf{k}} &= - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle = \\ &= - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} \left(\langle \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle - \langle \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \right)\end{aligned}$$

Como los Bogoliubones son fermiones libres

$$\langle \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = \langle \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}'}} + 1}$$

Campo medio

Autoconsistencia

Se tiene que

$$\begin{aligned}\langle \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle - \langle \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle &= 1 - \frac{2}{e^{\beta E_{\mathbf{k}'}} + 1} = \\ &= \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}}{2k_B T} \right)\end{aligned}$$

Por otro lado

$$u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} = |u_{\mathbf{k}'}|^2 \frac{v_{\mathbf{k}'}}{u_{\mathbf{k}'}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2\sqrt{\xi_{\mathbf{k}'}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}'}|^2}}$$

reemplazando...

Campo medio

Autoconsistencia

Obtenemos la ecuación del gap

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} \frac{V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}}{2k_B T} \right)$$

Como en BCS el potencial es independiente del momento, lo mismo esperamos de la función del gap (gap *tipo s*). Así

$$1 = \frac{v_0}{V} \sum_{k < k_D} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{E_{\mathbf{k}'}}{2k_B T} \right)$$

Pasando a energías

Campo medio

Autoconsistencia

Pasando a energías e introduciendo la densidad de estados *por espín*

$$1 = v_0 \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{g(\varepsilon)d\varepsilon}{2\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right)$$

$$\approx v_0 g(\varepsilon_F) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}}{2k_B T}\right)$$

Esta ecuación determina el gap a todas las temperaturas.

Ecuación del gap BCS

Límite de $T = 0$

Cuando vamos a bajas temperaturas, la tangente hiperbólica tiende a la unidad

$$1 = v_0 g(\varepsilon_F) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta_0^2}}, \text{ con } \Delta_0 = \Delta(T = 0).$$

Integrando

$$\frac{1}{v_0 g(\varepsilon_F)} = \operatorname{arcsinh} \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0} \right) \xrightarrow{\Delta_0 \ll \hbar\omega_D} \ln \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta_0} \right)$$

$$\Delta_0 = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{v_0 g(\varepsilon_F)}}$$

Ecuación del gap BCS

Límite de $\Delta = 0$ (obtenemos T_C)

Para obtener la temperatura crítica, podemos poner el gap igual a cero

$$1 = v_0 g(\varepsilon_F) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \tanh\left(\frac{\varepsilon}{2k_B T}\right).$$

Usando que $\hbar\omega_D \gg k_B T_C$ e integrando por partes

$$\frac{1}{v_0 g(\varepsilon_F)} \approx \ln\left(\frac{2e^{\gamma_E} \hbar\omega_D}{\pi k_B T_C}\right) \implies T_C = \frac{2e^{\gamma_E} \hbar\omega_D}{\pi k_B} e^{-\frac{1}{v_0 g(\varepsilon_F)}}$$

con $\gamma_E = 0,577$.

Ecuación del gap BCS

Predicciones

De la ecuación del gap (autoconsistencia), vemos las primeras consecuencias físicas de la teoría:

- Efecto isotópico de masa: $T_C \propto \omega_D$
- Relación entre temperatura crítica y gap:

$$\frac{2\Delta(T = 0)}{k_B T_C} = \frac{2\pi}{e^{\gamma_E}} \approx 3,528$$

Esta relación fue uno de los primeros éxitos de la teoría (todos los SC conocidos la verificaban) y ayudo a su aceptación general.

Estado fundamental

Estado fundamental de BCS

En la clase pasada vimos que el estado fundamental BCS era:

$$|BCS\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) |0\rangle$$

Dado el hamiltoniano BCS que hemos deducido, se desprende que por ser el fundamental, debe ser el “vacío” de los bogoliuvones

$$\gamma_{\mathbf{k}\sigma} |BCS\rangle = 0$$

Tomando el espín up por ejemplo, esto es

$$u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} |BCS\rangle = v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} |BCS\rangle$$

Estado fundamental

Estado fundamental de BCS

Reemplazando

$$u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} |BCS\rangle = u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \prod_{\mathbf{q}} \left(1 + \phi_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} \right) |0\rangle$$

El operador de destrucción conmuta con todos los términos de la productoria, salvo donde ambos momentos coinciden

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \left(1 + \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) &= u_{\mathbf{k}} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \right) \\ &= u_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + \cancel{u_{\mathbf{k}} \left(1 + \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}} \\ &= u_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \left(1 + \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) \end{aligned}$$

Estado fundamental

Estado fundamental de BCS

Por lo tanto

$$u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} |BCS\rangle = u_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} |BCS\rangle \iff \phi_{\mathbf{k}} = \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}.$$

De hecho, en su forma normalizada, el estado fundamental se escribe como

$$|BCS\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) |0\rangle$$

Estado fundamental

Estado fundamental de BCS

Propiedades:

$$|BCS\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) |0\rangle$$

La función $|v_{\mathbf{k}}|^2$ da la probabilidad de un par en el estado \mathbf{k} , mientras que $|u_{\mathbf{k}}|^2 = 1 - |v_{\mathbf{k}}|^2$ es la probabilidad de que no haya un par de Cooper en el estado \mathbf{k} .

Estado fundamental

Estado fundamental de BCS

Propiedades:

$$|BCS\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) |0\rangle = \exp \left[\sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right] |0\rangle$$

Como vimos anteriormente, el estado fundamental es un estado coherente de pares

$$|BCS\rangle = \sum_n \frac{1}{n!} (\Lambda^{\dagger})^n |0\rangle = \sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

donde el estado $|n\rangle$ contiene n pares ($2n$ electrones).

Estado fundamental

Estado fundamental de BCS

Propiedades:

$$|BCS\rangle = \sum_n \frac{1}{n!} (\Lambda^\dagger)^n |0\rangle = \sum_n \frac{1}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

El estado fundamental de BCS rompe la invarianza de gauge, dado que el cambio $c_{\mathbf{k}\sigma} \rightarrow e^{i\alpha} c_{\mathbf{k}\sigma}$ en los operadores electrónicos cambia la función de onda

$$|BCS\rangle \rightarrow |\alpha\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + e^{2i\alpha} \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle = \sum_n \frac{e^{i2n\alpha}}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

La función del gap también adquiere una fase.

Estado fundamental

Estado fundamental de BCS

Propiedades:

Por otro lado, la energía permanece invariante por lo que los estados $|\alpha\rangle$ forman una familia de estados degenerados.

El operador número actuando sobre los mismos da como resultado ($\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$):

$$\hat{N}|\alpha\rangle = \sum_n \frac{e^{i2n\alpha}}{\sqrt{n!}} 2n|n\rangle = -i \frac{d}{d\alpha} |\alpha\rangle \implies \boxed{\hat{N} = -i \frac{d}{d\alpha}}$$

El operador número es el generador de la transformación de gauge. Además la fase es conjugada de la ocupación,

$$[\hat{\alpha}, \hat{N}] = i$$

Estado fundamental

Estado fundamental de BCS

Propiedades:

Por lo tanto ambos operadores cumplen una relación de incertidumbre

$$\Delta\hat{\alpha}\Delta\hat{N} \gtrsim 1$$

Igual que un objeto macroscópico con una posición bien definida y un momento indeterminado, un condensado de pares con una fase global bien definida es un estado físico de la materia con un número indeterminado de partículas.

Es posible obtener

$$\Delta N = \langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle^{1/2} \quad \text{y} \quad \frac{\Delta N}{\langle N \rangle} \propto \frac{1}{\sqrt{\langle N \rangle}}.$$

Estado fundamental

Estado fundamental de BCS

¿Los pares de Cooper son bosones?

Los pares de Cooper son objetos compuestos de espín total cero. Como tales cumplen con la distribución de Bose-Einstein. De hecho en la descripción de campo medio de BCS hay más de un estado en el fundamental.

Sin embargo, el operador de creación de pares, $\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ no verifica las reglas de conmutación bosónicas.

El estado es “mixto”.

Excitaciones

Espectro de bogoliubones

La relación de dispersión es $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$.

Las funciones de la transformación de Bogoliubov

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \right)$$

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \right)$$

Excitaciones

Espectro de bogoliubones

Empecemos por la fase normal, $E_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}}$.

Las funciones de la transformación de Bogoliubov

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{|\xi_{\mathbf{k}}|} \right) = \begin{cases} 0 & \text{si } \xi_{\mathbf{k}} < 0 \\ 1 & \text{si } \xi_{\mathbf{k}} > 0 \end{cases}$$

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{|\xi_{\mathbf{k}}|} \right) = \begin{cases} 1 & \text{si } \xi_{\mathbf{k}} < 0 \\ 0 & \text{si } \xi_{\mathbf{k}} > 0 \end{cases}$$

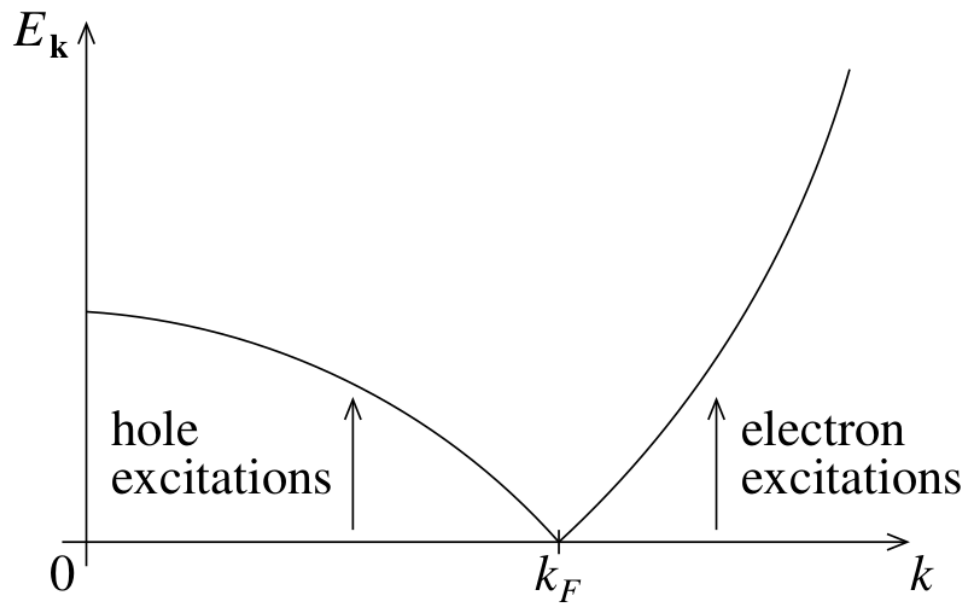
Excitaciones

Espectro de bogoliubones

Empecemos por la fase normal, $E_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}}$.

Por lo tanto, en la fase normal, $\gamma_{\mathbf{k}\sigma} \propto \hat{c}_{-\mathbf{k}-\sigma}^\dagger$, para $\xi_{\mathbf{k}} < 0$ y $\gamma_{\mathbf{k}\sigma} \propto \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$, para $\xi_{\mathbf{k}} > 0$.

Los operadores de Bogoliubov en la fase normal crean agujeros a energías menores a la de Fermi y electrones a energías mayores.

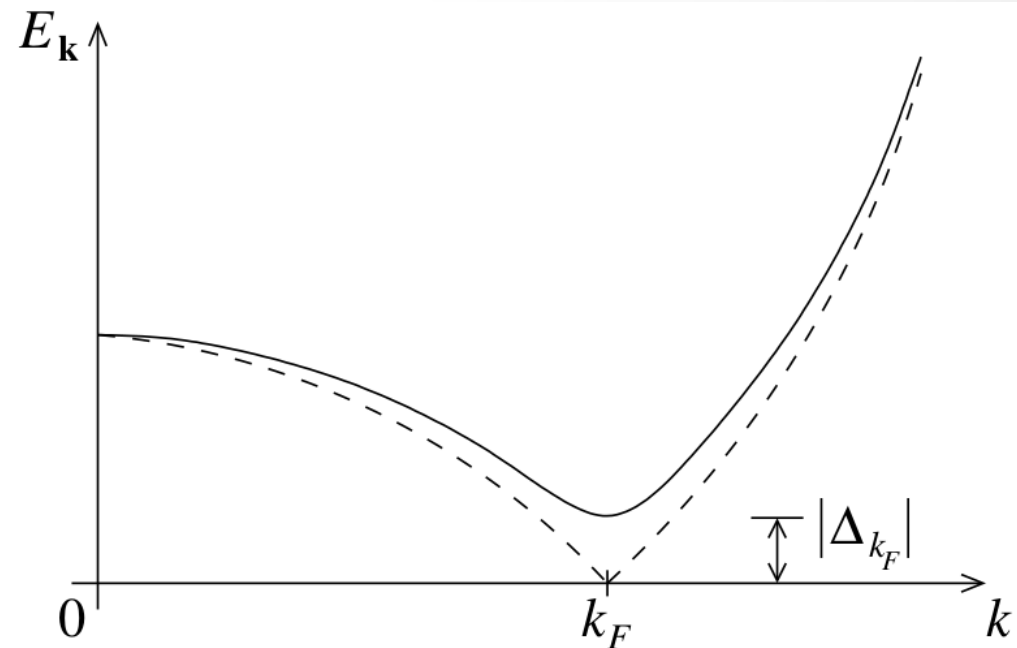


Excitaciones

Espectro de bogoliubones

En la fase superconductora, $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$ aparece un gap en el espectro de excitaciones.

La energía del sistema es la del fundamental si no hay cuasipartículas presentes y se incrementa (por lo menos en $|\Delta_{\mathbf{k}}|$) si aparecen excitaciones.

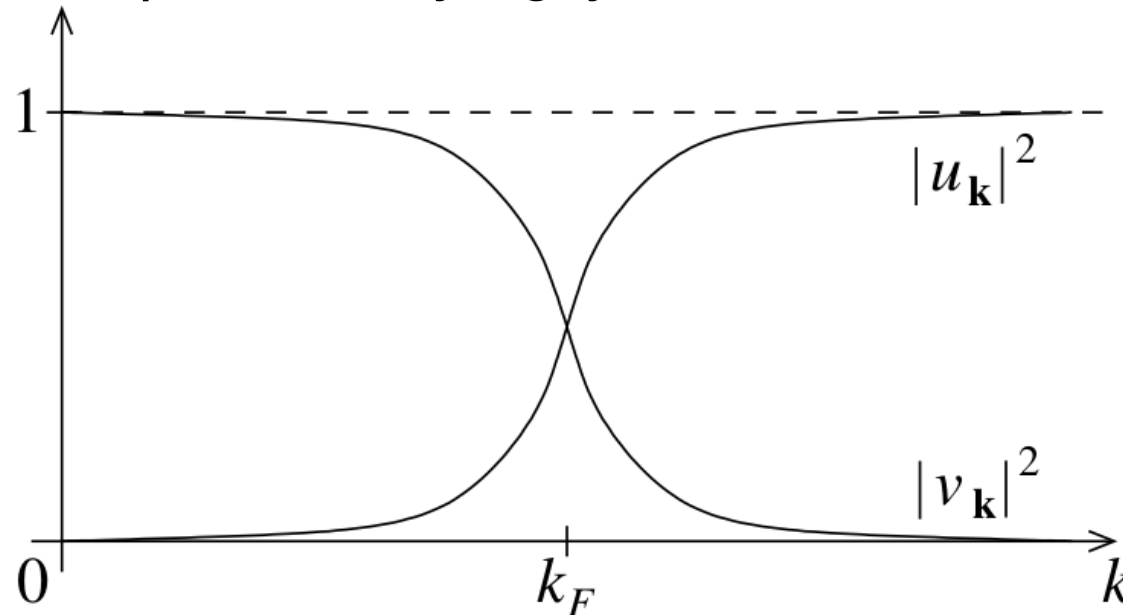


Excitaciones

Espectro de bogoliubones

En la fase superconductor, $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$ aparece un gap en el espectro de excitaciones.

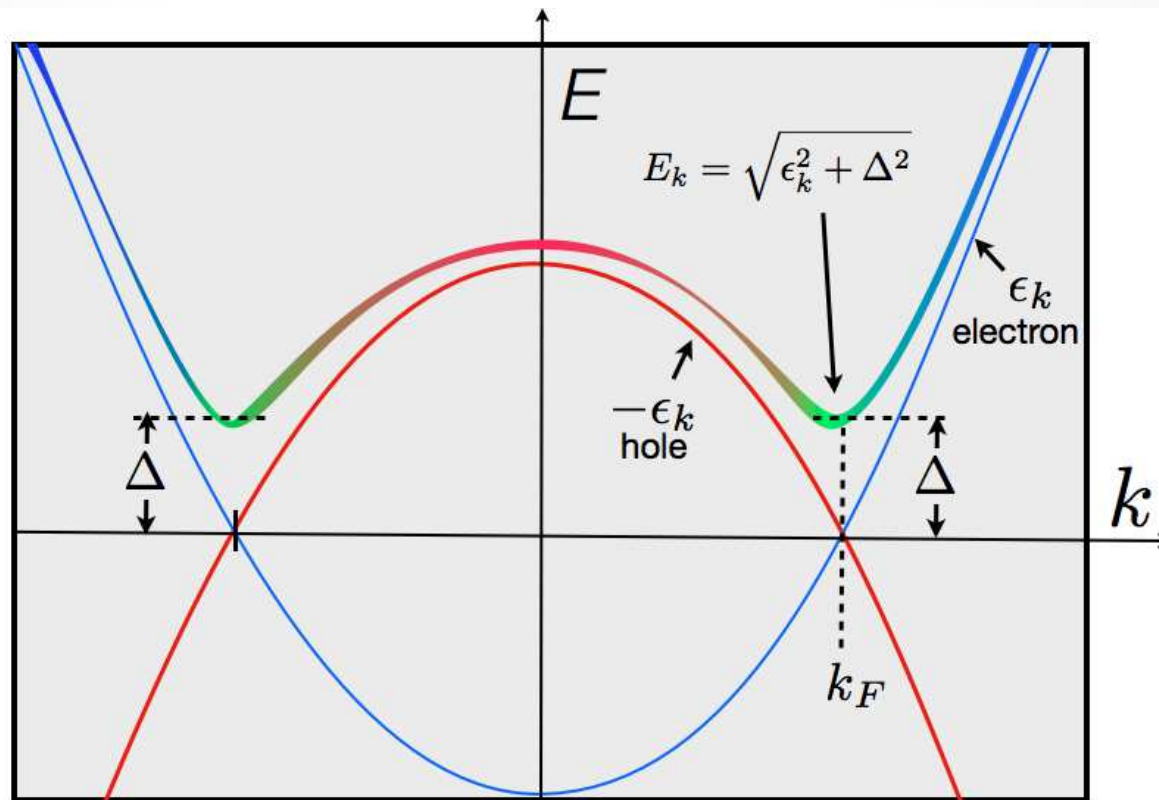
Además, en el superconductor las funciones de Bogoliubov toman valores entre 0 y 1, por lo tanto las excitaciones son superposiciones de partículas y agujeros.



Excitaciones

Espectro de bogoliubones

En la fase superconductora, $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$ aparece un gap en el espectro de excitaciones.



Calor específico

Entropía

Para obtener el calor específico, es más conveniente trabajar con la entropía

$$S = -k_B \sum_{\mathbf{k}\sigma} [(1 - f_{\mathbf{k}}) \ln(1 - f_{\mathbf{k}}) + f_{\mathbf{k}} \ln f_{\mathbf{k}}],$$

donde $f_{\mathbf{k}} = f(E_{\mathbf{k}})$.

El calor específico es

$$C = T \frac{dS}{dT} = -\beta \frac{dS}{d\beta}$$

Calor específico

Calor específico

Tomando la derivada

$$C = 2k_B\beta \sum_{\mathbf{k}} [-\ln(1 - f_{\mathbf{k}}) - 1 + \ln f_{\mathbf{k}} + 1] \frac{df_{\mathbf{k}}}{d\beta}$$

$$= 2k_B\beta \sum_{\mathbf{k}} \ln \left[\frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1} \frac{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}}} \right] \frac{df_{\mathbf{k}}}{d\beta}$$

$$= -2k_B\beta^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{df_{\mathbf{k}}}{d\beta} E_{\mathbf{k}} =$$

$$= -2k_B\beta^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial E_{\mathbf{k}}} \left(E_{\mathbf{k}}^2 + \frac{\beta}{2} \frac{d|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{d\beta} \right).$$

Calor específico

Calor específico

Más allá de la cuenta exacta, como la derivada de la función de Fermi es parecida a una delta, está suprimida exponencialmente cuando $E_{\mathbf{k}} \gg k_B T$.

Así, a bajas temperaturas, donde $k_B T \ll \Delta_{\min} \leq E_{\mathbf{k}}$, todos los términos en el calor específico están exponencialmente suprimidos, como se observa en los experimentos.

Esto es característico de los sistemas con un gap en su espectro de excitaciones.

Efecto Meissner

Energía cinética en presencia de campo

Consideremos el término de energía cinética en presencia de un campo magnético externo.

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$$

Al orden más bajo en el potencial vector $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$, donde \hat{H}_0 es la energía cinética en ausencia del campo y (en el gauge de Coulomb)

$$\hat{H}_1 = \frac{e}{m} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$$

Efecto Meissner

Operador corriente en segunda cuantización

En segunda cuantización, el operador corriente es

$$\hat{\mathbf{J}} = -\frac{e}{V} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \frac{1}{m} (\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$$

$$= -\frac{e^2}{m} \left(\frac{1}{V} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \right) \mathbf{A}$$

$$-\frac{e\hbar}{2mi} \sum_{\sigma} \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} \left[\hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \nabla \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) - \left(\nabla \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \right]$$

El primer término se conoce como “diamagnético” y el segundo “paramagnético”.

Efecto Meissner

Operador corriente en segunda cuantización

Evaluando el valor medio en el estado fundamental, a $T = 0$, tenemos

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_p + \mathbf{J}_d$$

con

$$\mathbf{J}_d = -\frac{ne^2}{m}\mathbf{A} \quad \text{y} \quad \mathbf{J}_p = \langle \hat{\mathbf{J}}_p \rangle$$

Si $\mathbf{J}_p = 0$ recuperamos el resultado de London con todos los electrones en el condensado (como corresponde a $T = 0$).

Sin embargo, el estado fundamental en presencia del campo no es el estado BCS.

Efecto Meissner

Estado fundamental

Lo que necesitamos es conocer como se modifica el estado fundamental BCS en presencia del campo aplicado.

Como la perturbación H_1 es lineal en el campo vector, \mathbf{J}_p podría contener un término que cancele al término diamagnético \mathbf{J}_d .

Esto es lo que sucede en el estado normal, donde no se observa el efecto Meissner.

Veamos que pasa en el estado superconductor. A primer orden en perturbaciones (ℓ son las excitaciones)

$$|BCS\rangle \equiv |0\rangle \rightarrow |0\rangle + \sum_{\ell \neq 0} |\ell\rangle \frac{\langle \ell | \hat{H}_1 | 0 \rangle}{E_0 - E_\ell}$$

Efecto Meissner

Perturbaciones

Como $\langle 0 | \hat{\mathbf{J}}_p | 0 \rangle = 0$ (no hay campo aplicado), tenemos

$$\mathbf{J}_p = \sum_{\ell \neq 0} \frac{\langle 0 | \hat{\mathbf{J}}_p | \ell \rangle \langle \ell | \hat{H}_1 | 0 \rangle}{E_0 - E_\ell} + \sum_{\ell \neq 0} \frac{\langle 0 | \hat{H}_1 | \ell \rangle \langle \ell | \hat{\mathbf{J}}_p | 0 \rangle}{E_0 - E_\ell}$$

Analicemos los elementos de matriz de

$$\hat{H}_1 = \frac{e}{m} \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) \hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$$

pasando a momentos

$$\hat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad \mathbf{A} = \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{A}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$$

Efecto Meissner

Perturbaciones

Como $\langle 0 | \hat{\mathbf{J}}_p | 0 \rangle = 0$ (no hay campo aplicado), tenemos

$$\mathbf{J}_p = \sum_{\ell \neq 0} \frac{\langle 0 | \hat{\mathbf{J}}_p | \ell \rangle \langle \ell | \hat{H}_1 | 0 \rangle}{E_0 - E_\ell} + \sum_{\ell \neq 0} \frac{\langle 0 | \hat{H}_1 | \ell \rangle \langle \ell | \hat{\mathbf{J}}_p | 0 \rangle}{E_0 - E_\ell}$$

Analicemos los elementos de matriz de

$$\hat{H}_1 = \frac{e\hbar}{m} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}}) \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$$

Efecto Meissner

Perturbaciones

Para hacer contacto con la teoría BCS, reescribamos el hamiltoniano en función de los bogoliubones.

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 &= \frac{e\hbar}{m} \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}}) \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} = \\ &= \frac{e\hbar}{m} \left[\sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow} \right] \\ &= \frac{e\hbar}{m} \left[\sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} (\mathbf{k}' + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}} \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow} \right]\end{aligned}$$

Efecto Meissner

Perturbaciones

Para hacer contacto con la teoría BCS, reescribamos el hamiltoniano en función de los bogoliubones. En el gauge de Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 = \mathbf{q} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}}$:

$$\hat{H}_1 = \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}\downarrow} \right)$$

Ahora se puede reescribir todo en función de los fermiones de Bogoliubov y usar que el fundamental $|0\rangle = |BCS\rangle$ es el vacío de los mismos.

Efecto Meissner

Perturbaciones

Los elementos de matriz a evaluar son

$$\langle \ell | \hat{H}_1 | 0 \rangle = \frac{e\hbar}{m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{q}} (u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} v_{\mathbf{k}} - u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) \langle \ell | \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | 0 \rangle$$

en el límite de \mathbf{q} tendiendo a cero (campo uniforme).

En este límite, claramente

$$\langle \ell | \hat{H}_1 | 0 \rangle \rightarrow 0$$

Además el denominador $E_0 - E_\ell$ nunca se anula, debido al gap.

Por lo tanto, en el estado superconductor $\mathbf{J}_p = 0$, y

$$\mathbf{J} = -\frac{ne^2}{m} \mathbf{A}$$

Fin de la clase

¡Muchas gracias!