

Elementos de la Teoría Microscópica de la Superconductividad Convencional Teoría Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS)

Fenómenos Colectivos en Sólidos – 1er Cuatrimestre 2021

Prof: Dr. Pablo Tamborenea

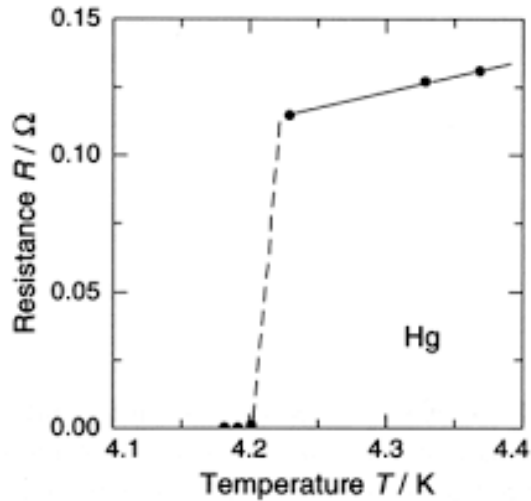
Autor: Ramiro Severino

Sumario

- Introducción:
 - *¿Qué es la Superconductividad?*
 - *Conductores Perfectos en la teoría electromagnética clásica*
 - *Teorías de Superconductividad*
- Interacción efectiva fonón-electrón: el núcleo de la superconductividad
 - *Evolución temporal de estados de partícula única*
 - *Corrección de orden 2 en la relación de dispersión electrónica*
 - *Interacción atractiva*
- El Hamiltoniano y el ansatz BCS
- La función gap

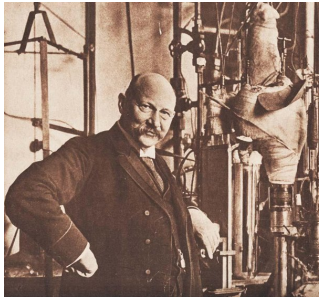
El fenómeno de la Superconductividad

1911 – 1913: **Licuefacción del Helio**, experimentos con Hg descubren una transición a resistividad nula para temperaturas del orden de 4 K

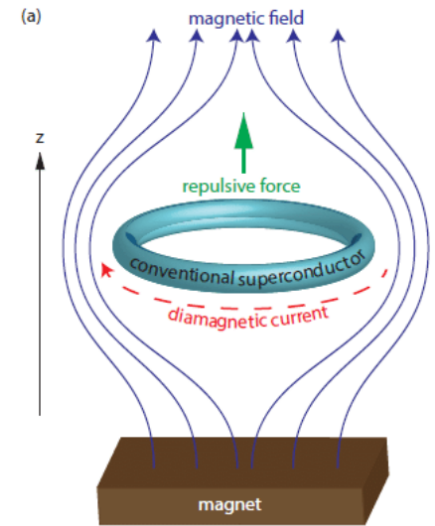


1933 – **Efecto Meissner**, expulsión del campo magnético del interior del superconductor.

En un superconductor convencional, ante la acción de un campo magnético externo, se inducen corrientes superficiales (y por lo tanto, existe un campo magnético rotacional de espesor λ) que apantallan el campo externo y no permiten que penetre el material



Heike Kamerlingh Onnes



Superconductor = Resistencia Nula + Expulsión del campo magnético de su interior

¿Qué podemos decir clásicamente? : Apantallamiento del campo alterno y skin depth

Ecuaciones de Maxwell

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} & \vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= -\frac{\rho_q}{\epsilon_0} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 & \vec{\nabla} \times \vec{B} &= \mu_0 \vec{J}\end{aligned}$$

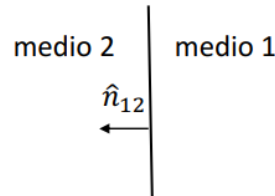
Ecuación constitutiva: $\vec{E} = \rho \vec{J}$ o $\vec{J} = \sigma \vec{E}$; ρ no depende de \vec{J}



$$\vec{\nabla}^2 \vec{B} = \mu_0 \sigma \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

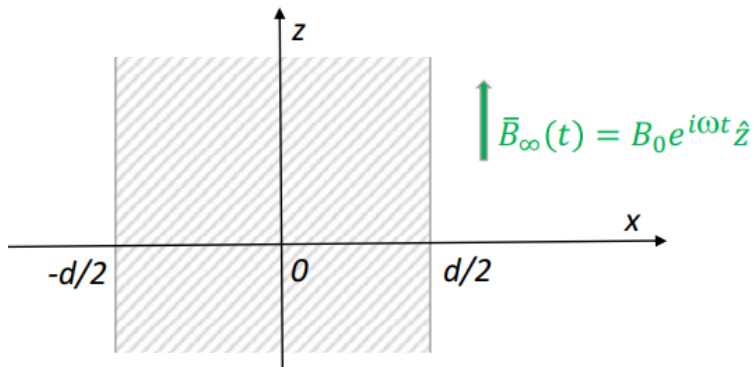
$$(\vec{B}_2 - \vec{B}_1) \cdot \hat{n}_{12} = 0$$

$$(\vec{B}_2 - \vec{B}_1) \times \hat{n}_{12} = \mu_0 \vec{K}_s$$



Campo externo uniforme \longrightarrow $B(r,t) = B_0$ es solución!

Si $\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \neq 0 \Rightarrow \vec{\nabla}^2 \vec{B} \neq 0$ \longrightarrow Corrientes inducidas!



Por simetria: $\vec{B}(\vec{r}, t) = B(x, t) \hat{z} \Rightarrow \vec{\nabla}^2 \vec{B} = \frac{\partial^2 B}{\partial x^2}$

Solución del tipo: $B(x, t) = e^{-kx} e^{i\omega t}$

$$\left. \begin{aligned}\frac{\partial B}{\partial t} &= i\omega B \\ \frac{\partial^2 B}{\partial x^2} &= k^2 B\end{aligned} \right\} (1) \Rightarrow \begin{aligned}k^2 B &= \mu_0 \sigma i\omega B \\ \Rightarrow k^2 &= \mu_0 \sigma i\omega\end{aligned}$$

$$\Rightarrow k = \sqrt{\frac{\mu_0 \sigma i\omega}{2}} (1 \pm i) = \frac{1}{\delta} (1 \pm i)$$

$$\Rightarrow k = \sqrt{\frac{\mu_0 \sigma i \omega}{2}} (1 \pm i) = \frac{1}{\delta} (1 \pm i)$$

$$\delta = \sqrt{\frac{2}{\mu_0 \sigma \omega}} = \sqrt{\frac{2\rho}{\mu_0 \omega}} = \sqrt{\frac{2\rho}{\mu_0 \pi f}}$$

Skin depth

En un conductor perfecto, σ es infinita y por lo tanto $\rho=0$. ¿Entonces $\delta = 0$?

$$\frac{d\langle \bar{p} \rangle}{dt} = -\frac{\langle \bar{p} \rangle}{\tau} - e\bar{E} \longrightarrow \frac{d\langle \bar{p} \rangle}{dt} = -e\bar{E} \text{ si } t \ll \tau \text{ (conductor perfecto)}$$

Modelo de Drude

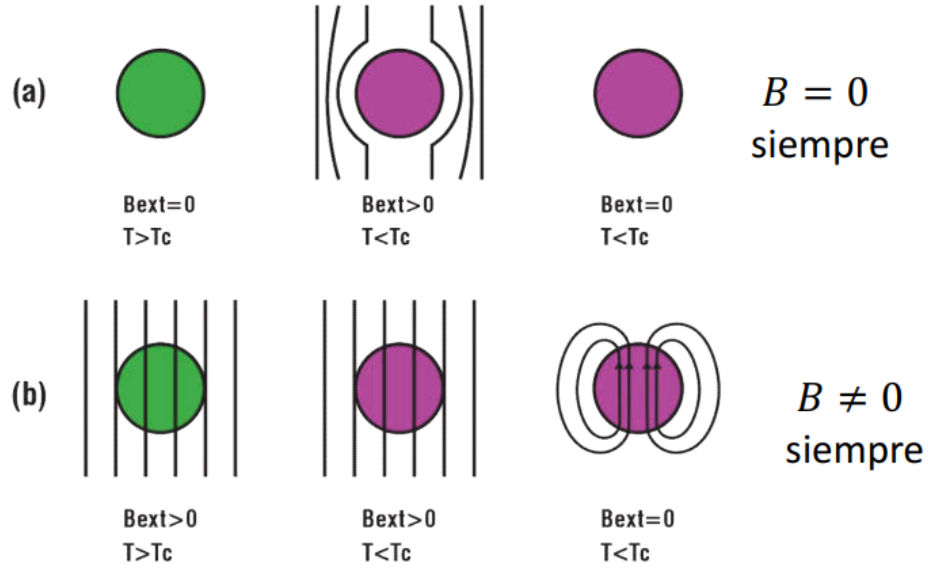
$$\bar{J} = -ne\langle \bar{v} \rangle = -\frac{ne}{m}\langle \bar{p} \rangle \Rightarrow \frac{\partial \bar{J}}{\partial t} = -\frac{ne}{m} \frac{\partial \langle \bar{p} \rangle}{\partial t} = -\frac{ne}{m} (-e\bar{E}) \longrightarrow \frac{\partial \bar{J}}{\partial t} = \frac{ne^2}{m} \bar{E}$$

$$\bar{v}^2 \left(\frac{\partial \bar{B}}{\partial t} \right) = \frac{1}{\lambda_L^2} \frac{\partial \bar{B}}{\partial t}$$

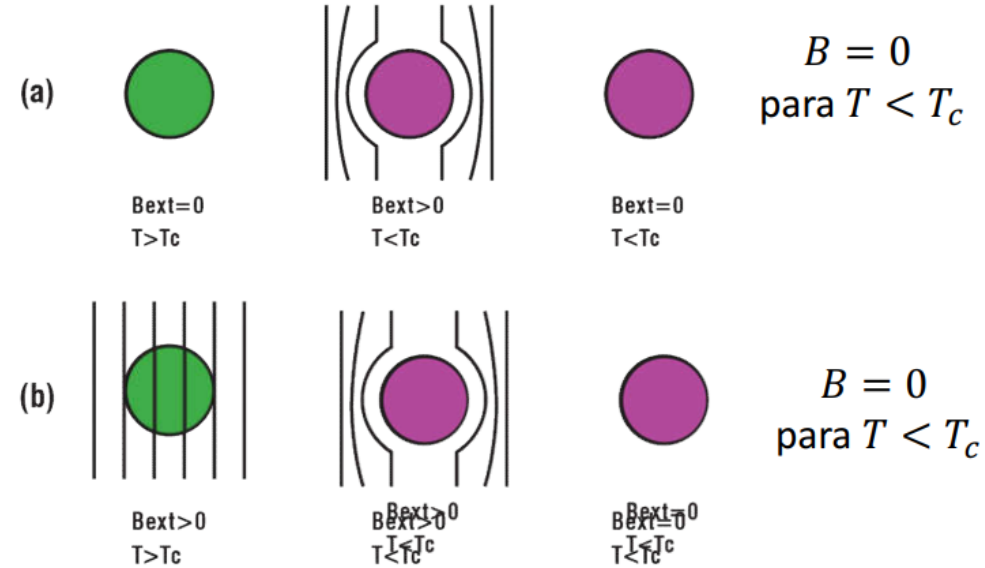
$$\lambda_L^2 = \frac{m}{\mu_0 ne^2}$$

Un conductor perfecto apantalla la variación temporal del campo en su interior

Sistema conductor perfecto a $T < T_c$



Sistema superconductor a $T < T_c$



Conclusión: Un superconductor no es solamente un conductor perfecto!!

Modelos de superconductividad deben incluir ambas situaciones descritas anteriormente

1) **Modelo de London, o de “los dos fluidos”**: Existen portadores normales y superconductores. Para $T = 0$, la densidad de portadores es completamente SC y si $T > T_c$ esta densidad es nula. Describen con ecuaciones:

$$\mu_0 \bar{\nabla} \times \bar{J} = -\frac{1}{\lambda_L^2} \bar{B}$$

$$\bar{\nabla}^2 \bar{B} = \frac{1}{\lambda_L^2} \bar{B}$$

2) **Teoría Fenomenológica de Ginzburg-Landau**: Basada en la teoría de transiciones de Fase de Landau. Describe mediante una energía libre y un parámetro de orden. Similar a teorías de campos, en particular el modelo Abelian de Higgs:

$$F_s = \int dV \left[\alpha_{GL} |\psi|^2 + \frac{\beta_{GL}}{2} |\psi|^4 + \frac{1}{2m} \left| \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + \frac{(\nabla \times \mathbf{A})^2}{8\pi} \right]$$

$$0 = \alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \frac{i\hbar e}{2mc} \psi \nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{i\hbar e}{mc} \mathbf{A} \cdot \nabla \psi + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 \psi$$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar e}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A} |\psi|^2$$

3) **Descripción microscópica de la superconductividad**: Teoría BCS explica la superconductividad convencional mediante una interacción efectiva entre electrones y fonones y la formación de un condensado bosónico de electrones acoplados.

La temperatura crítica de transición entre el estado normal y el superconductor es variable entre isótopos del mismo material. Por lo tanto, hay alguna influencia estructural. Una primera idea es pensar que pasa entre los fonones de la red cristalina y el gas de electrones subyacente.

$$\hat{H} = H_e^0 + \hat{H}_{el-ph} + \hat{H}_{ph}$$

$$H_e^0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}$$

Ground state es estados de partícula única con energía ϵ_k menores que la energía de Fermi.

$$|\psi_0\rangle = \prod_{\epsilon_k < \epsilon_F} a_{k,\uparrow}^\dagger a_{k,\downarrow}^\dagger |0\rangle$$

Estados de Bloch

$$\hat{H}_{ph} = \prod_{q \in BZ} \omega_q (b_q^\dagger b_q + \frac{1}{2})$$

Fonones con una única polarización, de frecuencia ω_q .

$$\hat{H}_{el-ph} = \sum_{k,q \in BZ} \sum_{\sigma} V_q (\hat{b}_q + \hat{b}_{-q}^\dagger) a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}$$

Interacción efectiva electrón-fonón

$$[\hat{H}_{el-ph}, b_q^\dagger b_q] \neq 0 \quad ; \quad [\hat{H}_{el-ph}, a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}] = 0$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{el-ph}, a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}] = 0 \\ \frac{d}{dt} b_q^\dagger b_q &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{el-ph}, b_q^\dagger b_q] \neq 0 \end{aligned}$$

$$[\hat{H}_{el-ph}, b_q^\dagger b_q] \neq 0 \quad ; \quad [\hat{H}_{el-ph}, a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}] = 0 \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt} a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{el-ph}, a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}] = 0 \\ \frac{d}{dt} b_q^\dagger b_q &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{el-ph}, b_q^\dagger b_q] \neq 0 \end{aligned}$$

Estados con números fijos de fonones no son autoestado del hamiltoniano de interacción.

¿Cómo evoluciona un estado de un **único electrón** ante H? $|\Phi(t=0)\rangle = a_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle = |0\rangle_{ph} \times a_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle_{el}$

$$|\Phi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Phi(t=0)\rangle \cong |\Phi(t=0)\rangle - it\hat{H}|\Phi(t=0)\rangle$$

$$[\hat{H}_{el-ph}, b_q^\dagger b_q] \neq 0 \quad ; \quad [\hat{H}_{el-ph}, a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}] = 0 \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt} a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{el-ph}, a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}] = 0 \\ \frac{d}{dt} b_q^\dagger b_q &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{el-ph}, b_q^\dagger b_q] \neq 0 \end{aligned}$$

Estados con números fijos de fonones no son autoestado del hamiltoniano de interacción.

¿Cómo evoluciona un estado de un **único electrón** ante H? $|\Phi(t=0)\rangle = a_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle = |0\rangle_{ph} \times a_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle_{el}$

$$|\Phi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Phi(t=0)\rangle \cong |\Phi(t=0)\rangle - it\hat{H}|\Phi(t=0)\rangle$$

$$H_0^e |\Phi(t=0)\rangle = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} a_{k',\sigma'}^\dagger |0\rangle = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k,\sigma}^\dagger (\underbrace{\delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{k,k'}}_{\text{blue}} - \underbrace{a_{k',\sigma'}^\dagger a_{k,\sigma}}_{\text{red}}) |0\rangle = \epsilon'_k a_{k',\sigma'}^\dagger |0\rangle$$

$$[\hat{H}_{el-ph}, b_q^\dagger b_q] \neq 0 \quad ; \quad [\hat{H}_{el-ph}, a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}] = 0 \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt} a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{el-ph}, a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}] = 0 \\ \frac{d}{dt} b_q^\dagger b_q &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{el-ph}, b_q^\dagger b_q] \neq 0 \end{aligned}$$

Estados con números fijos de fonones no son autoestado del hamiltoniano de interacción.

¿Cómo evoluciona un estado de un **único electrón** ante H? $|\Phi(t=0)\rangle = a_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle = |0\rangle_{ph} \times a_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle_{el}$

$$|\Phi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Phi(t=0)\rangle \cong |\Phi(t=0)\rangle - it\hat{H}|\Phi(t=0)\rangle$$

$$H_0^e |\Phi(t=0)\rangle = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} a_{k',\sigma'}^\dagger |0\rangle = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k,\sigma}^\dagger (\delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{k,k'} - a_{k',\sigma'}^\dagger a_{k,\sigma}) |0\rangle = \epsilon'_k a_{k',\sigma'}^\dagger |0\rangle$$

$$\begin{aligned} H_{el-ph} |\Phi(t=0)\rangle &= \sum_{k,q \in BZ} \sum_{\sigma} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{k+q,\sigma}^\dagger \underbrace{a_{k,\sigma} a_{k',\sigma'}^\dagger}_{\text{cancel}} |0\rangle = \sum_{\sigma} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{k+q,\sigma}^\dagger \underbrace{(\delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'} - a_{k',\sigma'}^\dagger a_{k,\sigma})}_{\text{cancel}} |0\rangle \\ &= \sum_q V_q b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger |0\rangle \end{aligned}$$

$$[\hat{H}_{el-ph}, b_q^\dagger b_q] \neq 0 \quad ; \quad [\hat{H}_{el-ph}, a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}] = 0 \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt} a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{el-ph}, a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma}] = 0 \\ \frac{d}{dt} b_q^\dagger b_q &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{el-ph}, b_q^\dagger b_q] \neq 0 \end{aligned}$$

Estados con números fijos de fonones no son autoestado del hamiltoniano de interacción.

¿Cómo evoluciona un estado de un **único electrón** ante H? $|\Phi(t=0)\rangle = a_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle = |0\rangle_{ph} \times a_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle_{el}$

$$|\Phi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Phi(t=0)\rangle \cong |\Phi(t=0)\rangle - it\hat{H}|\Phi(t=0)\rangle$$

$$H_0^e |\Phi(t=0)\rangle = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} a_{k',\sigma'}^\dagger |0\rangle = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k a_{k,\sigma}^\dagger (\delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{k,k'} - a_{k',\sigma'}^\dagger a_{k,\sigma}) |0\rangle = \epsilon'_k a_{k',\sigma'}^\dagger |0\rangle$$

$$\begin{aligned} H_{el-ph} |\Phi(t=0)\rangle &= \sum_{k,q \in BZ} \sum_{\sigma} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k,\sigma} a_{k',\sigma'}^\dagger |0\rangle = \sum_{\sigma} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{k+q,\sigma}^\dagger (\delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'} - a_{k',\sigma'}^\dagger a_{k,\sigma}) |0\rangle \\ &= \sum_q V_q b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger |0\rangle \end{aligned}$$

$$\implies |\Phi(t=\delta)\rangle = \left((1 - i\delta\epsilon_k) - \sum_q V_q b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger \right) |\Phi(t=0)\rangle$$

$$\implies |\Phi(t = \delta)\rangle = \left((1 - i\delta\epsilon_k) - \sum_q V_q b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger \right) |\Phi(t = 0)\rangle$$

1) Los estados de electrón único emiten fonones, con una probabilidad Vq . Si se sigue la dinámica de esta manera, se abre la posibilidad de absorber un fonón además de emitir un segundo fonón. Esto muestra que los electrones provocan deformaciones de la red y están rodeados de una nube de fonones.

2) La presencia de la nube cambiará las propiedades del electrón, en particular su relación de dispersión.

¿Como corrige la relación de dispersión la interacción electrón-fonón?



Teoría de Perturbaciones a orden 2

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{n_e, n_{ph}} \frac{\langle \Phi_{1,0} | H_{el-ph} | \Phi_{n_e, n_{ph}} \rangle \langle \Phi_{n_e, n_{ph}} | H_{el-ph} | \Phi_{1,0} \rangle}{E_{1,0} - E_{n_e, n_{ph}}}$$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{n_e, n_{ph}} \frac{\langle \Phi_{1,0} | H_{el-ph} | \Phi_{n_e, n_{ph}} \rangle \langle \Phi_{n_e, n_{ph}} | H_{el-ph} | \Phi_{1,0} \rangle}{E_{1,0} - E_{n_e, n_{ph}}}$$

$|\Phi_{n_e, n_{ph}} \rangle$ —————> Autoestados del hamiltoniano electrónico + fonónico

$|\Phi_{1,0} \rangle = a_{k,\sigma}^\dagger |0 \rangle$ $E_{1,0} = E_k/\hbar$ ¿Como opera el hamiltoniano sobre este estado?

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{n_e, n_{ph}} \frac{\langle \Phi_{1,0} | H_{el-ph} | \Phi_{n_e, n_{ph}} \rangle \langle \Phi_{n_e, n_{ph}} | H_{el-ph} | \Phi_{1,0} \rangle}{E_{1,0} - E_{n_e, n_{ph}}}$$

$|\Phi_{n_e, n_{ph}} \rangle$  Autoestados del hamiltoniano electrónico + fonónico

$|\Phi_{1,0} \rangle = a_{k,\sigma}^\dagger |0 \rangle$ $E_{1,0} = E_k/\hbar$ ¿Como opera el hamiltoniano sobre este estado?

$$H_{el-ph} |\Phi_{1,0} \rangle = \sum_{q,p,\alpha} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{p+q,\alpha}^\dagger a_{p,\alpha} a_{k,\sigma}^\dagger |0 \rangle$$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{n_e, n_{ph}} \frac{\langle \Phi_{1,0} | H_{el-ph} | \Phi_{n_e, n_{ph}} \rangle \langle \Phi_{n_e, n_{ph}} | H_{el-ph} | \Phi_{1,0} \rangle}{E_{1,0} - E_{n_e, n_{ph}}}$$

$|\Phi_{n_e, n_{ph}} \rangle \longrightarrow$ Autoestados del hamiltoniano electrónico + fonónico

$|\Phi_{1,0} \rangle = a_{k,\sigma}^\dagger |0 \rangle \quad E_{1,0} = E_k/\hbar \quad \text{¿Como opera el hamiltoniano sobre este estado?}$

$$H_{el-ph} |\Phi_{1,0} \rangle = \sum_{q,p,\alpha} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{p+q,\alpha}^\dagger a_{p,\alpha} a_{k,\sigma}^\dagger |0 \rangle$$

$$H_{el-ph} |\Phi_{1,0} \rangle = \sum_{q,p,\alpha} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{p+q,\alpha}^\dagger (\delta_{k,p} \delta_{\sigma,\alpha} - a_{k,\sigma}^\dagger a_{p,\alpha}) |0 \rangle$$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{n_e, n_{ph}} \frac{\langle \Phi_{1,0} | H_{el-ph} | \Phi_{n_e, n_{ph}} \rangle \langle \Phi_{n_e, n_{ph}} | H_{el-ph} | \Phi_{1,0} \rangle}{E_{1,0} - E_{n_e, n_{ph}}}$$

$|\Phi_{n_e, n_{ph}}\rangle \longrightarrow$ Autoestados del hamiltoniano electrónico + fonónico

$|\Phi_{1,0}\rangle = a_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle \quad E_{1,0} = E_k/\hbar \quad \text{¿Como opera el hamiltoniano sobre este estado?}$

$$H_{el-ph} |\Phi_{1,0}\rangle = \sum_{q,p,\alpha} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{p+q,\alpha}^\dagger a_{p,\alpha} a_{k,\sigma}^\dagger |0\rangle$$

$$H_{el-ph} |\Phi_{1,0}\rangle = \sum_{q,p,\alpha} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{p+q,\alpha}^\dagger (\delta_{k,p} \delta_{\sigma,\alpha} - a_{k,\sigma}^\dagger a_{p,\alpha}) |0\rangle$$

$$H_{el-ph} |\Phi_{1,0}\rangle = \sum_{q,p,\alpha} \delta_{k,p} \delta_{\sigma,\alpha} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{p+q,\alpha}^\dagger |0\rangle = \sum_q V_q (b_q a_{k+q,\sigma}^\dagger + b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger) |0\rangle$$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{n_e, n_{ph}} \frac{\langle \Phi_{1,0} | H_{el-ph} | \Phi_{n_e, n_{ph}} \rangle \langle \Phi_{n_e, n_{ph}} | H_{el-ph} | \Phi_{1,0} \rangle}{E_{1,0} - E_{n_e, n_{ph}}}$$

$|\Phi_{n_e, n_{ph}} \rangle \longrightarrow$ Autoestados del hamiltoniano electrónico + fonónico

$|\Phi_{1,0} \rangle = a_{k,\sigma}^\dagger |0 \rangle \quad E_{1,0} = E_k/\hbar \quad \text{¿Como opera el hamiltoniano sobre este estado?}$

$$H_{el-ph} |\Phi_{1,0} \rangle = \sum_{q,p,\alpha} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{p+q,\alpha}^\dagger a_{p,\alpha} a_{k,\sigma}^\dagger |0 \rangle$$

$$H_{el-ph} |\Phi_{1,0} \rangle = \sum_{q,p,\alpha} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{p+q,\alpha}^\dagger (\delta_{k,p} \delta_{\sigma,\alpha} - a_{k,\sigma}^\dagger a_{p,\alpha}) |0 \rangle$$

$$H_{el-ph} |\Phi_{1,0} \rangle = \sum_{q,p,\alpha} \delta_{k,p} \delta_{\sigma,\alpha} V_q (b_q + b_{-q}^\dagger) a_{p+q,\alpha}^\dagger |0 \rangle = \sum_q V_q (b_q a_{k+q,\sigma}^\dagger + b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger) |0 \rangle$$

$$\sum_q V_q b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger |0 \rangle$$

$$H_{el-ph}|\Phi_{1,0}\rangle = \sum_q V_q b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger |0\rangle$$

En la suma sobre todos los estados fonon-electrón contribuye solo este término!

Este es un estado de un electrón con un fonón y tiene energía $E_{1,1} = \epsilon_{k+q} + \omega_q$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_q \frac{\langle \Phi_{1,0} | H_{el-ph} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)}$$

$$H_{el-ph}|\Phi_{1,0}\rangle = \sum_q V_q b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger |0\rangle$$

En la suma sobre todos los estados fonon-electrón contribuye solo este término!

Este es un estado de un electrón con un fonón y tiene energía $E_{1,1} = \epsilon_{k+q} + \omega_q$

$$\longrightarrow (\Delta E)^{(2)} = \sum_q \frac{\langle \Phi_{1,0} | H_{el-ph} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)}$$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{k,q,q',\sigma'} \frac{V_q}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)} \langle 0 | a_{k,\sigma} (b_{q'} + b_{-q'}^\dagger) a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle$$

$$H_{el-ph}|\Phi_{1,0}\rangle = \sum_q V_q b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger |0\rangle$$

En la suma sobre todos los estados fonon-electrón contribuye solo este término!

Este es un estado de un electrón con un fonón y tiene energía $E_{1,1} = \epsilon_{k+q} + \omega_q$

$$\longrightarrow (\Delta E)^{(2)} = \sum_q \frac{\langle \Phi_{1,0} | H_{el-ph} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)}$$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{k,q,q',\sigma'} \frac{V_q}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)} \langle 0 | a_{k,\sigma} (b_{q'} + b_{-q'}^\dagger) a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle$$

$$\langle 0 | a_{k,\sigma} b_{-q'}^\dagger = \langle 0 | b_{-q'}^\dagger a_{k,\sigma} = 0$$

$$H_{el-ph}|\Phi_{1,0}\rangle = \sum_q V_q b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger |0\rangle$$

En la suma sobre todos los estados fonon-electrón contribuye solo este término!

Este es un estado de un electrón con un fonón y tiene energía $E_{1,1} = \epsilon_{k+q} + \omega_q$

$$\longrightarrow (\Delta E)^{(2)} = \sum_q \frac{\langle \Phi_{1,0} | H_{el-ph} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)}$$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{k,q,q',\sigma'} \frac{V_q}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)} \langle 0 | a_{k,\sigma} (b_{q'} + b_{-q'}^\dagger) a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle$$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{k,q,q',\sigma'} \frac{V_q}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)} \langle 0 | a_{k,\sigma} b_{q'} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle$$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{k,q,q',\sigma'} \frac{V_q}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)} \langle 0 | a_{k,\sigma} b_{q'} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle$$

$$\langle 0 | a_{k,\sigma} b_{q'} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \underbrace{b_{q'} b_{-q}^\dagger}_{\delta_{q',-q} + b_{-q}^\dagger b_{q'}} a_{k,\sigma} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger \underbrace{a_{k',\sigma'} a_{k+q,\sigma}^\dagger}_{\delta_{k',k+q} \delta_{\sigma,\sigma'} - a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k',\sigma'}} | 0 \rangle$$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{k,q,q',\sigma'} \frac{V_q}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)} \langle 0 | a_{k,\sigma} b_{q'} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle$$

$$\langle 0 | a_{k,\sigma} b_{q'} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \underbrace{b_{q'} b_{-q}^\dagger}_{\delta_{q',-q} + b_{-q}^\dagger b_{q'}} a_{k,\sigma} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger \underbrace{a_{k',\sigma'} a_{k+q,\sigma}^\dagger}_{\delta_{k',k+q} \delta_{\sigma,\sigma'} - a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k',\sigma'}} | 0 \rangle$$

Conmuta al
frente y da cero

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{k,q,q',\sigma'} \frac{V_q}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)} \langle 0 | a_{k,\sigma} b_{q'} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle$$

$$\langle 0 | a_{k,\sigma} b_{q'} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \underbrace{b_{q'} b_{-q}^\dagger}_{\delta_{q',-q} + b_{-q}^\dagger b_{q'}} a_{k,\sigma} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger \underbrace{a_{k',\sigma'} a_{k+q,\sigma}^\dagger}_{\delta_{k',k+q} \delta_{\sigma,\sigma'} - a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k',\sigma'}} | 0 \rangle$$

Es cero
directamente

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{k,q,q',\sigma'} \frac{V_q}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)} \langle 0 | a_{k,\sigma} b_{q'} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle$$

$$\langle 0 | a_{k,\sigma} b_{q'} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \underbrace{b_{q'} b_{-q}^\dagger}_{\delta_{q',-q} + b_{-q}^\dagger b_{q'}} a_{k,\sigma} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger \underbrace{a_{k',\sigma'} a_{k+q,\sigma}^\dagger}_{\delta_{k',k+q} \delta_{\sigma,\sigma'} - a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k',\sigma'}} | 0 \rangle$$

$$\delta_{q',-q} + b_{-q}^\dagger b_{q'}$$

Conmuta al frente y da cero

$$\delta_{k',k+q} \delta_{\sigma,\sigma'} - a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k',\sigma'}$$

Es cero directamente



$$\sum_{k,q,q',\sigma'} \underbrace{\delta_{q',-q} \delta_{k',k+q} \delta_{\sigma,\sigma'}}_{\substack{\sigma' = \sigma \\ q' = -q \\ k' = k+q}} \langle 0 | a_{k,\sigma} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger | 0 \rangle$$

$$\sigma' = \sigma$$

$$q' = -q$$

$$k' = k+q$$

$$k'-q = k$$

$$k'+q' = k$$

$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_{k,q,q',\sigma'} \frac{V_q}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)} \langle 0 | a_{k,\sigma} b_{q'} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle$$

$$\langle 0 | a_{k,\sigma} b_{q'} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger a_{k',\sigma'} b_{-q}^\dagger a_{k+q,\sigma}^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | \underbrace{b_{q'} b_{-q}^\dagger}_{\delta_{q',-q} + b_{-q}^\dagger b_{q'}} a_{k,\sigma} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger \underbrace{a_{k',\sigma'} a_{k+q,\sigma}^\dagger}_{\delta_{k',k+q} \delta_{\sigma,\sigma'} - a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k',\sigma'}} | 0 \rangle$$

$$\delta_{q',-q} + b_{-q}^\dagger b_{q'}$$



Conmuta al frente y da cero

$$\delta_{k',k+q} \delta_{\sigma,\sigma'} - a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k',\sigma'}$$



Es cero directamente



$$\sum_{k,q,q',\sigma'} \delta_{q',-q} \delta_{k',k+q} \delta_{\sigma,\sigma'} \langle 0 | a_{k,\sigma} a_{k'+q',\sigma'}^\dagger | 0 \rangle = \sum_q \langle 0 | a_{k,\sigma} a_{k,\sigma}^\dagger | 0 \rangle$$



$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_q \frac{V_q^2}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)}$$



$$(\Delta E)^{(2)} = \sum_q \frac{V_q^2}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)}$$

La relación de dispersión de un electrón se “renormaliza” por la energía de interacción fonón-electrón

Si consideramos ahora un sistema con 2 electrones, se puede mostrar que:

$$\begin{aligned} (\Delta E)_{k,k'}^{(2)} &= \sum_q \frac{V_q^2}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)} + \frac{V_q^2}{\epsilon_{k'} - (\epsilon_{k'-q} + \omega_q)} \\ &= \sum_q V_q^2 \left[\frac{1}{(\epsilon_k + \epsilon_{k'}) - (\epsilon_{k+q} + \epsilon_k + \omega_q)} + \frac{1}{(\epsilon_k + \epsilon_{k'}) - (\epsilon_{k'-q} + \epsilon_k + \omega_q)} \right] \\ &\langle 0 | a_{k',\sigma} a_{k,\sigma} a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k'+q',\sigma'}^\dagger | 0 \rangle \end{aligned}$$

$$(\Delta E)_{k,k'}^{(2)} = \sum_q \frac{V_q^2}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \omega_q)} + \frac{V_q^2}{\epsilon_{k'} - (\epsilon_{k'-q} + \omega_q)}$$

$$\sum_q V_q^2 \left[\frac{1}{(\epsilon_k + \epsilon_{k'}) - (\epsilon_{k+q} + \epsilon_k + \omega_q)} + \frac{1}{(\epsilon_k + \epsilon_{k'}) - (\epsilon_{k'-q} + \epsilon_k + \omega_q)} \right]$$

$$\langle 0 | a_{k',\sigma} a_{k,\sigma} a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k'+q',\sigma'}^\dagger | 0 \rangle$$

Este elemento de matriz se anula a menos que $q=0$, $\sigma=\sigma'$ y $k=k'-q$

El término de intercambio de momento electrón-fonón tiene la forma de teoría de perturbaciones de orden 1 con un potencial efectivo

$$\frac{1}{2} \sum_q \sum_{k,k',\sigma,\sigma'} V_q^{eff}(k, k') a_{k+q,\sigma}^\dagger a_{k'-q,\sigma}^\dagger a_{k',\sigma} a_{k,\sigma}$$

$$V_q^{eff}(k, k') = V_q^2 \left[\frac{1}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \epsilon_k + \omega_q)} + \frac{1}{\epsilon_{k'} - (\epsilon_{k'-q} + \epsilon_k + \omega_q)} \right]$$

En una situación colectiva, solo tendrán contribuciones aquellos electrones en la cercanía de la superficie de Fermi del material. Entonces, se puede aproximar:

$$\epsilon_{k+q} - \epsilon_k \cong \epsilon_{k'} - \epsilon_{k'-q}$$



$$V_q^{eff}(k, k') = V_q^2 \left[\frac{1}{\epsilon_k - (\epsilon_{k+q} + \epsilon_k + \omega_q)} + \frac{1}{\epsilon_{k'} - (\epsilon_{k'-q} + \epsilon_k + \omega_q)} \right]$$

En una situación colectiva, solo tendrán contribuciones aquellos electrones en la cercanía de la superficie de Fermi del material. Entonces, se puede aproximar:

$$\epsilon_{k+q} - \epsilon_k \cong \epsilon_{k'} - \epsilon_{k'-q}$$



$$V_q^{eff} \cong V_q^2 \frac{2\omega_q}{(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k)^2 - \omega_q^2}$$

Para que estos electrones se afecten mutuamente, es necesario que los estados finales $(k+q, \sigma)$ y $(k'-q, \sigma')$ estén desocupados. En la cercanía de la energía de Fermi, los estados se mezclan bastante ya que están muy cercanos los ocupados y los desocupados. Por lo tanto, la ecuación del potencial se escribe como:

$$V_q^{eff} \cong -\frac{V_q^2}{\omega_q}$$

$$V_q^{eff} \cong -\frac{V_q^2}{\omega_q}$$

El secreto de la superconductividad se encuentra en esta expresión. **Un electrón deforma la red a su alrededor lo que implica que el electrón emite fonones que median esa interacción.** Los fonones emitidos por los electrones individuales terminan mediando una interacción atractiva entre electrones!

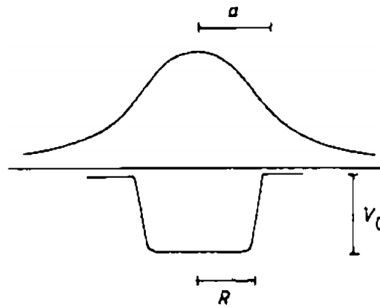
Pero....¿Es suficiente? Veamos un ejemplo sencillo...

$$V_q^{eff} \cong -\frac{V_q^2}{\omega_q}$$

El secreto de la superconductividad se encuentra en esta expresión. Un electrón deforma la red a su alrededor lo que implica que el electrón emite fonones que median esa interacción. Los fonones emitidos por los electrones individuales terminan mediando una interacción atractiva entre electrones!

Pero....¿Es suficiente? Veamos un ejemplo sencillo...

$$E_{pot} \cong \begin{cases} -\left(\frac{R}{a}\right)^3 V_0 & ; R < a \\ -V_0 & ; R \geq a \end{cases}$$



Existen estados ligados si $E_{pot} + E_{cin} < 0$

$$E_{pot} + E_{cin} = -\frac{R^3}{a^3} V_0 + \frac{\hbar^2}{2ma^2} < 0 \implies \frac{\hbar^2 a}{2mR^3} < V_0$$

Existe la chance de que para un pozo de potencial atractivo no se compense la energía cinética y por lo tanto no tenga estados ligados!

Conclusión: El fenómeno de la superconductividad es mas que una interacción atractiva entre electrones mediada por fonones

Supongamos dos electrones en la superficie de Fermi.

Interacción efectiva
electrón-electrón
mediada por fonones



Electrones se buscan
atraer (Pares de Cooper).
Singlete de spin

*Este es un efecto de muchos
cuerpos porque necesitamos los
estados ocupados del mar de
Fermi que tengan momento
menor al del par!*

¿Como forman pares los electrones en un mar de otros electrones que quieren hacer lo mismo? —————▶ **Problema autoconsistente**: apareamiento + background

Supongamos dos electrones en la superficie de Fermi.

Interacción efectiva
electrón-electrón
mediada por fonones



Electrones se buscan
atraer (Pares de Cooper).
Singlete de spin

*Este es un efecto de muchos
cuerpos porque necesitamos los
estados ocupados del mar de
Fermi que tengan momento
menor al del par!*

¿Como forman pares los electrones en un mar de otros electrones que quieren hacer lo mismo? —————▶ **Problema autoconsistente**: apareamiento + background

Objetivo: diferenciar el estado normal del superconductor. Imposible en términos de diferencias de energías (escalas chicas, $T_c k_B$ del orden de 10^{-4} eV)

Supongamos dos electrones en la superficie de Fermi.

Interacción efectiva
electrón-electrón
mediada por fonones

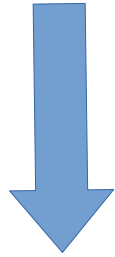


Electrones se buscan
atraer (Pares de Cooper).
Singlete de spin

*Este es un efecto de muchos
cuerpos porque necesitamos los
estados ocupados del mar de
Fermi que tengan momento
menor al del par!*

¿Como forman pares los electrones en un mar de otros electrones que quieren hacer lo mismo? —————> **Problema autoconsistente**: apareamiento + background

Objetivo: diferenciar el estado normal del superconductor. Imposible en términos de diferencias de energías (escalas chicas, $T_c k_B$ del orden de 10^{-4} eV)



Para ver que difiere en cada estado es suficiente considerar un par de Cooper en estado de reposo y se absorben los grados de libertad fonónicos en un potencial efectivo electrón-electrón atractivo

Para ver que difiere en cada estado es suficiente considerar un par de Cooper en estado de reposo y se absorben los grados de libertad fonónicos en un potencial efectivo electrón-electrón atractivo

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{p,\sigma} \epsilon_p a_{p,\sigma}^\dagger a_{p,\sigma} + \sum_{p,q} V_{pq} a_{p,\uparrow}^\dagger a_{-p,\downarrow}^\dagger a_{-q,\downarrow} a_{q,\uparrow}$$

Energía cinética de los pares

Interacción entre 2 pares, que es una interacción de 4 electrones

Nobel Prize-worth Ansatz: $|\psi\rangle_{BCS} = \prod_k (u_k + v_k a_{k,\uparrow}^\dagger a_{-k,\downarrow}^\dagger) |0\rangle$

Notable: el numero de partículas no es un buen número cuántico para esta función de onda! Partes con distinto número se mezclan.

$$\begin{aligned} |v_k| = 1 & \quad \text{and} \quad u_k = 0 & \quad \text{for } \epsilon_k < \epsilon_F \\ v_k = 0 & \quad \text{and} \quad |u_k| = 1 & \quad \text{otherwise} \end{aligned}$$



En este límite se recupera la función de onda del problema sin perturbar

El numero de partículas solo tiene sentido en valor medio. Por lo tanto, es necesario establecer un potencial químico μ y minimizar respecto de este constraint utilizando multiplicadores de Lagrange

$$\langle \psi_{BCS} | \hat{H}_{BCS} - \mu \hat{N} | \psi_{BCS} \rangle = \langle \psi_{BCS} | \hat{H}_{BCS} | \psi_{BCS} \rangle - \langle \psi_{BCS} | \mu \hat{N} | \psi_{BCS} \rangle$$

$$2 \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \times \prod_{\mathbf{p} \neq \mathbf{k}} (u_{\mathbf{p}}^* u_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}}^* v_{\mathbf{p}})$$

$$+ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} \times \prod_{\substack{\mathbf{p} \neq \mathbf{k} \\ \mathbf{p} \neq \mathbf{k}'}} (u_{\mathbf{p}}^* u_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}}^* v_{\mathbf{p}})$$

$$2 \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \times \prod_{\mathbf{p} \neq \mathbf{k}} (u_{\mathbf{p}}^* u_{\mathbf{p}} + v_{\mathbf{p}}^* v_{\mathbf{p}})$$

Como la función debe estar normalizada: $\langle \psi_{BCS} | \psi_{BCS} \rangle = \prod_{\mathbf{p}} (|u_{\mathbf{p}}|^2 + |v_{\mathbf{p}}|^2) = 1$

Parametrizamos como: $u_{\mathbf{k}} = \sin(\theta_{\mathbf{k}})$ $v_{\mathbf{k}} = e^{i\phi_{\mathbf{k}}} \cos(\theta_{\mathbf{k}})$

Entonces:

$$\langle \psi_{BCS} | \hat{H} - \mu \hat{N} | \psi_{BCS} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) (1 + \cos(2\theta_{\mathbf{k}})) + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{1}{4} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) \sin(2\theta_{\mathbf{k}'}) e^{i(\phi_{\mathbf{k}'} - \phi_{\mathbf{k}})}$$

Minimizando respecto del parámetro, se tiene:

$$\frac{d}{d\theta_k} \langle \psi_{BCS} | \hat{H} - \mu \hat{N} | \psi_{BCS} \rangle = 0 \quad \longrightarrow$$

$$e^{i\phi_k} = e^{i\alpha}$$

$$\text{tg}(2\theta_k) = -\frac{e^{i\alpha} \Delta_k}{\epsilon_k - \mu}$$

$$\Delta_k = -\sum_{k'} V_{k,k'} u_{k'}^* v_{k'}$$

Minimizando respecto del parámetro, se tiene:

$$\frac{d}{d\theta_k} \langle \psi_{BCS} | \hat{H} - \mu \hat{N} | \psi_{BCS} \rangle = 0 \quad \longrightarrow$$

$$e^{i\phi_k} = e^{i\alpha}$$

$$\operatorname{tg}(2\theta_k) = -\frac{e^{i\alpha} \Delta_k}{\epsilon_k - \mu}$$

$$\Delta_k = -\sum_{k'} V_{k,k'} u_{k'}^* v_{k'}$$

$$|\Delta_k| = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k,k'} \sin(2\theta_k) = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k,k'} \sin\left(\arctan\left(-\frac{\Delta_{k'}}{\epsilon_{k'} - \mu}\right)\right)$$

Minimizando respecto del parámetro, se tiene:

$$\frac{d}{d\theta_k} \langle \psi_{BCS} | \hat{H} - \mu \hat{N} | \psi_{BCS} \rangle = 0 \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} e^{i\phi_k} &= e^{i\alpha} \\ \text{tg}(2\theta_k) &= -\frac{e^{i\alpha} \Delta_k}{\epsilon_k - \mu} \\ \Delta_k &= -\sum_{k'} V_{k,k'} u_{k'}^* v_{k'} \end{aligned}$$

$$|\Delta_k| = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k,k'} \sin(2\theta_k) = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k,k'} \sin\left(\arctan\left(-\frac{\Delta_{k'}}{\epsilon_{k'} - \mu}\right)\right)$$

$$\sin(\arctan(x)) = \frac{x}{\sqrt{1+x^2}} \quad \longrightarrow \quad \Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\Delta_{k'}^2 + (\epsilon_{k'} - \mu)^2}} = \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}}$$

Nos interesa saber que pasa con esta ecuación en el entorno de la energía de Fermi. Allí, la interacción se hace sencilla y se puede modelar:

$$V_{k,k'} \begin{cases} -\frac{V}{\Omega} & ; |\epsilon_k - \mu| < \omega_D \wedge |\epsilon_{k'} - \mu| < \omega_D \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \quad \longrightarrow \quad \text{Frecuencia de Debye, parámetro de cut-off. Del orden de la energía de un fonón, 1meV.}$$

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\Delta_{k'}^2 + (\epsilon_F - \mu)^2}} = \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}} \quad V_{k,k'} \begin{cases} -\frac{V}{\Omega} & ; |\epsilon_k - \mu| < \omega_D \wedge |\epsilon_{k'} - \mu| < \omega_D \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$\Delta_k = \begin{cases} \Delta & ; |\epsilon_F - \mu| < \omega_D \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \longrightarrow |\Delta_k| = e^{-i\alpha} \Delta_k = e^{-i\alpha} \Delta$$

$$|\Delta_k| = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k,k'} \sin(2\theta_k) = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k,k'} \sin\left(\arctan\left(-\frac{\Delta_{k'}}{\epsilon_{k'} - \mu}\right)\right)$$

$$|\Delta| = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k,k'} \sin(2\theta_k) = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{\Delta}{E_k} \implies \sin(2\theta_k) = \frac{|\Delta|}{E_k}$$

$$\longrightarrow |\Delta_k| = e^{-i\alpha} \Delta = -\frac{1}{2} \sum_{k'} V_{k,k'} \frac{|\Delta|}{E_k} = \frac{V}{2\Omega} |\Delta| \sum_{|\epsilon_f - \mu| < \omega_D} \frac{1}{E_k}$$

$$e^{-i\alpha} \frac{\Delta}{|\Delta|} = 1 = \frac{V}{2\Omega} \sum_{|\epsilon_f - \mu| < \omega_D} \frac{1}{\sqrt{|\Delta|^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}}$$


$$e^{-i\alpha} \frac{\Delta}{|\Delta|} = 1 = \frac{V}{2\Omega} \sum_{|\epsilon_f - \mu| < \omega_D} \frac{1}{\sqrt{|\Delta|^2 + (\epsilon_k - \mu)^2}}$$

Límite de acoplamiento bajo: 1) $V\nu(0) < E_F$ con $\nu(0) = 1/\Omega dN/d\epsilon$ ($\epsilon = \mu$)

2) La densidad de estados es básicamente la densidad en la energía de Fermi

Con estas consideraciones, se puede cambiar la suma por una integral:

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{1}{2} V \nu(0) \int_{\mu - \omega_D}^{\mu + \omega_D} \frac{d\epsilon}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + |\Delta|^2}} \\ &= V \nu(0) \sinh^{-1}(\omega_D / |\Delta|) \end{aligned}$$

 $|\Delta| = \frac{\omega_D}{\sinh \left[\frac{1}{\nu(0)V} \right]} \cong 2\omega_D e^{-\frac{1}{\nu(0)V}}$

$$\langle \psi_{BCS} | \hat{H} - \mu \hat{N} | \psi_{BCS} \rangle = \sum_k (\epsilon_k - \mu) (1 + \cos(2\theta_k)) + \sum_{k,k'} \frac{1}{4} V_{k,k'} \sin(2\theta_k) \sin(2\theta_{k'}) e^{i(\phi_{k'} - \phi_k)} \quad |\psi_0 \rangle = \prod_{\epsilon_k < \epsilon_F} a_{k,\uparrow}^\dagger a_{k,\downarrow}^\dagger |0 \rangle$$



$$\begin{aligned} \delta E &= \langle \Psi_{BCS} | \hat{H}_{\text{red}} - \mu \hat{N} | \Psi_{BCS} \rangle - \langle \Psi_n | \hat{H}_{\text{red}} - \mu N | \Psi_n \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left[(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) (1 + \cos(2\theta_{\mathbf{k}})) - \frac{1}{2} \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) |\Delta_{\mathbf{k}}| \right] - \sum_{\epsilon_{\mathbf{k}} \leq \mu} 2(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta E}{\Omega} &= 2\nu(0) \int_{\mu}^{\mu + \omega_D} (\epsilon - \mu) d\epsilon \\ &\quad + \nu(0) \int_{\mu - \omega_D}^{\mu + \omega_D} (\epsilon - \mu) \frac{-(\epsilon - \mu) d\epsilon}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + |\Delta|^2}} - \nu(0) |\Delta| \frac{|\Delta|}{\nu(0)V} \\ &= \nu(0) \omega_D^2 - 2\nu(0) \frac{\omega_D}{2} \sqrt{\omega_D^2 + |\Delta|^2} + 2\nu(0) \frac{|\Delta|^2}{2} \sinh^{-1} \frac{\omega_D}{|\Delta|} - \frac{|\Delta|^2}{V} \\ &\cong 0 - \frac{1}{2} \nu(0) |\Delta|^2 + \nu(0) |\Delta|^2 \frac{1}{\nu(0)V} - \frac{|\Delta|^2}{V} \\ &= -\frac{1}{2} \nu(0) |\Delta|^2. \end{aligned}$$

- La diferencia de energía entre los estados es proporcional a $|\Delta|$.
- Los estados profundos se mantienen ocupados así como los altamente energéticos. La diferencia entre estados solo es apreciable en una región pequeña de tamaño $|\Delta|$

$$|\Delta| \cong 2\omega_D e^{-\frac{1}{\nu(0)V}}$$

$$\frac{\delta E}{\Omega} \cong -\frac{1}{2}\nu(0)|\Delta|^2$$




$$\frac{\delta E}{\Omega} \cong -2\omega_D^2 \nu(0) e^{-\frac{2}{\nu(0)V}}$$

Este modelo muestra que la energía en el estado superconductor se disminuye respecto del estado normal!

¿Qué falta?

Se puede demostrar que la teoría BCS tiene un análogo tipo Hartree-Fock (RPA):

$$\hat{H}_{\text{HF}} = \int dx \hat{\psi}_x^\dagger \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u(x) \right] \hat{\psi}_x \\ + \int dx \int dy \rho(y, y) v(y, x) \hat{\psi}_x^\dagger \hat{\psi}_x - \int dx \int dy \rho(y, x) v(y, x) \hat{\psi}_y^\dagger \hat{\psi}_x$$


$$\hat{H}_{\text{eff}} = \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left[\frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right] \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \\ - \int d^3r \Delta(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) - \int d^3r \Delta^*(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r})$$

with the expectation value

$$\Delta(\mathbf{r}) \equiv -(-V) \langle \hat{\psi}_{\downarrow}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle$$

¿Qué falta?

La función Δ se interpreta como función de gap analizando los estados excitados de BCS

$$\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} \equiv u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \quad \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^{\dagger} = u_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} - v_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \quad \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} = u_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}$$

$$\hat{\gamma}_{\mathbf{k}1} \equiv v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} + u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \quad \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^{\dagger} = v_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} + u_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \quad \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} = -v_{\mathbf{k}}^* \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^{\dagger}$$

$$\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} |\Psi_{\text{BCS}}\rangle = 0$$

$$\hat{\gamma}_{\mathbf{k}1} |\Psi_{\text{BCS}}\rangle = 0$$

$$\{\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^{\dagger}, \hat{\gamma}_{\mathbf{k}'1}^{\dagger}\} = 0 = \{\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}, \hat{\gamma}_{\mathbf{k}'1}\}$$

$$\{\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}, \hat{\gamma}_{\mathbf{k}'1}^{\dagger}\} = 0 = \{\hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}, \hat{\gamma}_{\mathbf{k}'0}^{\dagger}\}$$

$$\{\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}, \hat{\gamma}_{\mathbf{k}'0}^{\dagger}\} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \{\hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}, \hat{\gamma}_{\mathbf{k}'1}^{\dagger}\}$$

Esta interpretación muestra que los operadores redefinidos crean/destruyen cuasi-partículas a partir de un nuevo “vacío” dado por el GS de BCS

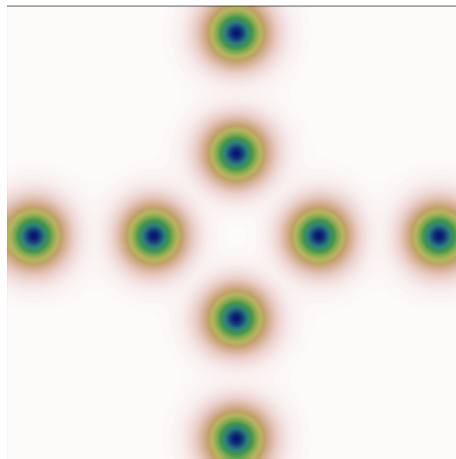
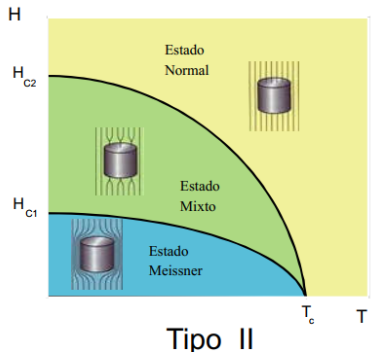
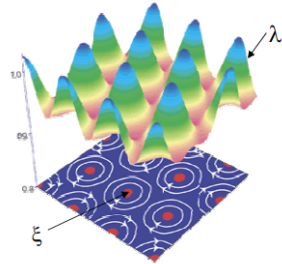
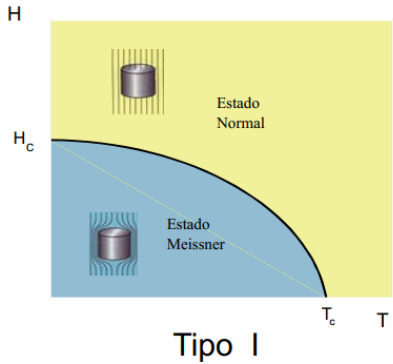


$$\hat{H}_{\text{red}} \cong E_{\text{normal}} + \delta E + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} (\hat{\gamma}_{\mathbf{k}0}^{\dagger} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}0} + \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1}^{\dagger} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}1})$$

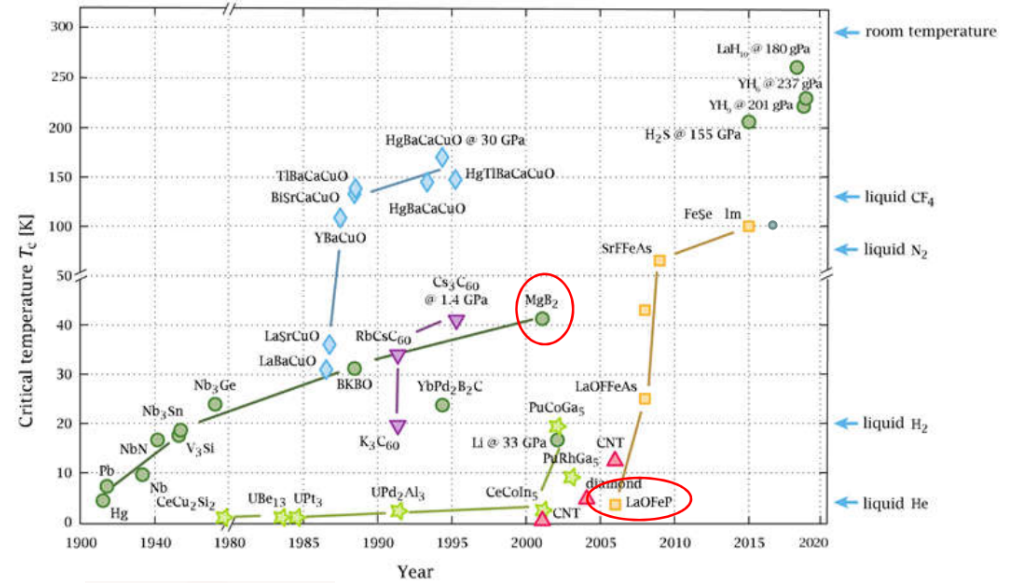
$$\min_{\mathbf{k}} (E_{\mathbf{k}}) = \min_{\mathbf{k}} \sqrt{|\Delta|^2 + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2} = |\Delta|.$$

¿Cómo sigue?

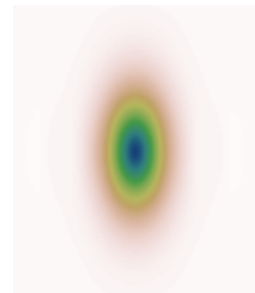
Superconductividad tipo I y tipo II



Superconductividad no convencional



Superconductores con orden nemático



¡Gracias por escuchar!