

Superconductividad III

Prof. Alberto Camjayi

Introducción

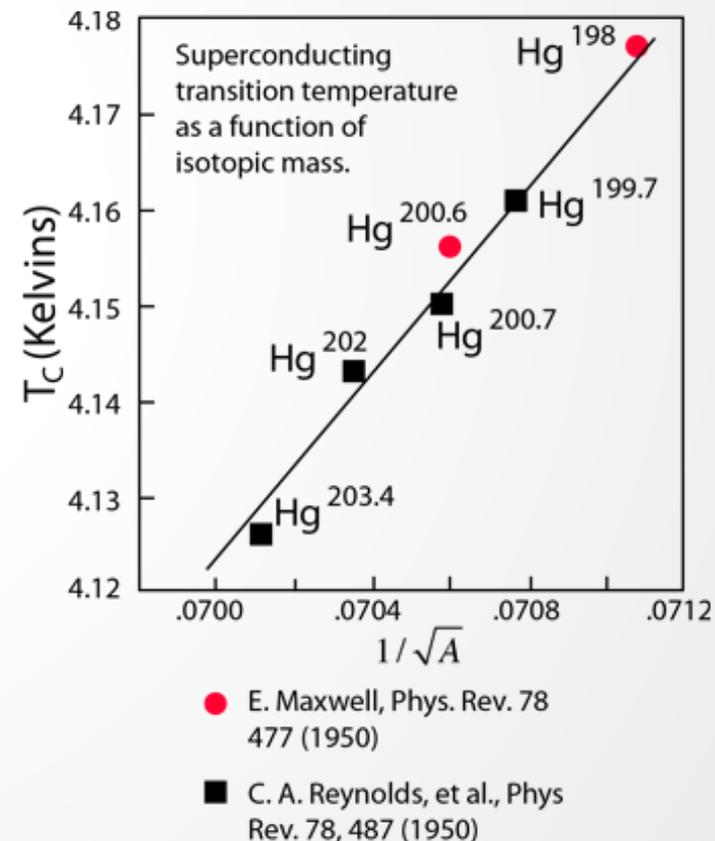
Efecto isotópico de masa (1950)

A la par que Ginzburg y Landau presentaban su teoría fenomenológica, una nueva pieza del rompecabezas entró en escena: se descubrió el efecto isotópico de masa.

¡La temperatura crítica depende de la masa de los iones!

En los fonones $\omega = \sqrt{\frac{K}{M}}$

Experimentalmente $T_C \sqrt{M} = \text{cte.}$

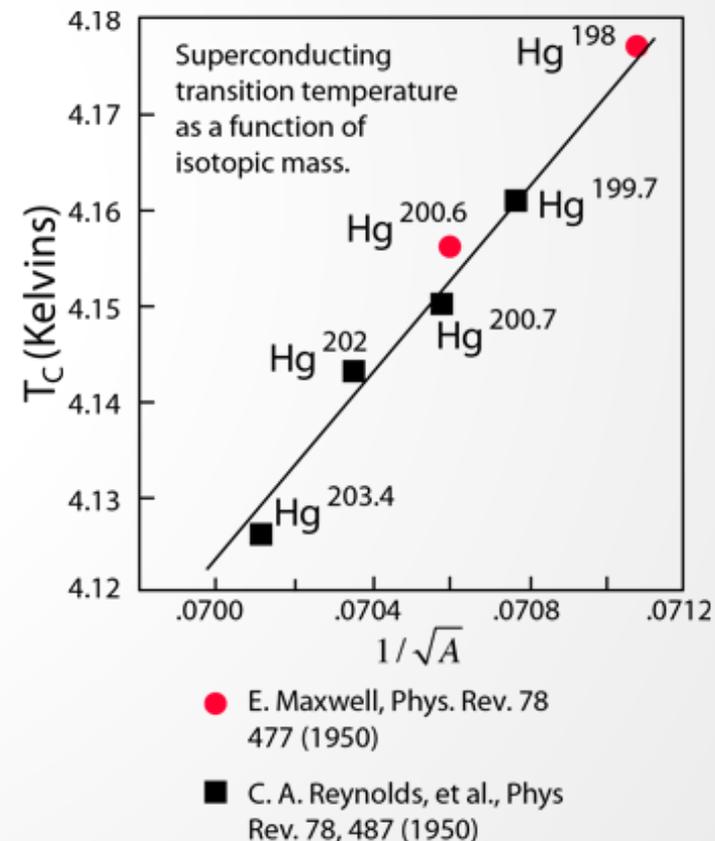


Introducción

Efecto isotópico de masa (1950)

A la par que Ginzburg y Landau presentaban su teoría fenomenológica, una nueva pieza del rompecabezas entró en escena: se descubrió el efecto isotópico de masa.

Esto indica que los fonones están participando en la física de los SC. De hecho para la misma época, y desconociendo este resultado, Fröhlich comenzaba a trabajar con una teoría de la SC que incluía la interacción electrón-fonón.



Interacción electrón-fonón

Potencial electrón-ión

En una red de Bravais (por simplicidad no incluiremos una base), el potencial de interacción electrón-ión se escribe simplemente como la interacción de Coulomb entre los iones y la densidad electrónica:

$$V_{e-i\acute{o}n} = \int d\mathbf{r} (-e) \rho_e(\mathbf{r}) \sum_{j=1}^N V_{i\acute{o}n}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j).$$

Si introducimos las vibraciones de la red, $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_j^0 + \mathbf{u}_j$, podemos hacer un desarrollo perturbativo para incorporar los fonones.

Interacción electrón-fonón

Potencial electrón-fonón

Desarrollando el potencial iónico

$$V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \approx V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) - \nabla_{\mathbf{r}} V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) \cdot \mathbf{u}_j$$

se obtiene

$$V_{\text{e-ión}} \approx \int d\mathbf{r} (-e) \rho_e(\mathbf{r}) \sum_{j=1}^N V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) -$$
$$- \int d\mathbf{r} (-e) \rho_e(\mathbf{r}) \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{r}} V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) \cdot \mathbf{u}_j.$$

Interacción electrón-fonón

Potencial electrón-fonón

Desarrollando el potencial iónico

$$V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \approx V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) - \nabla_{\mathbf{r}} V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) \cdot \mathbf{u}_j$$

se obtiene

$$V_{\text{e-ión}} \approx \int d\mathbf{r} (-e) \rho_e(\mathbf{r}) \sum_{j=1}^N V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) - \underbrace{\int d\mathbf{r} (-e) \rho_e(\mathbf{r}) \sum_{j=1}^N \nabla_{\mathbf{r}} V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) \cdot \mathbf{u}_j}_{V_{\text{e-f}}}$$

Bloch

Interacción electrón-fonón

Potencial electrón-fonón

Es más útil trabajar en la representación de momentos, por lo que transformaremos Fourier la expresión.

Por un lado escribimos el vector desplazamiento en función de los operadores de creación y destrucción:

$$\mathbf{u}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in 1\text{BZ}} \sum_{\nu} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{\mathbf{k}\nu}}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}\nu} + \hat{a}_{-\mathbf{k}\nu}^\dagger \right) \mathbf{e}_{\mathbf{k}\nu} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j^0}$$

Por otro lado

$$\nabla_{\mathbf{r}} V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q} \in 1\text{BZ}} \sum_{\mathbf{G} \in \text{RR}} i(\mathbf{q} + \mathbf{G}) V_{\mathbf{q}+\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{G}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0)}.$$

Interacción electrón-fonón

Potencial electrón-fonón

Es más útil trabajar en la representación de momentos, por lo que transformaremos Fourier la expresión.

Así obtenemos

$$\sum_{j=1}^N e \nabla_{\mathbf{r}} V_{\text{ión}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j^0) \cdot \mathbf{u}_j =$$
$$= \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{q} \in 1\text{BZ} \\ \nu}} \sum_{\mathbf{G} \in \text{RR}} g_{\mathbf{q}, \mathbf{G}, \nu} \left(\hat{a}_{\mathbf{q}\nu} + \hat{a}_{-\mathbf{q}\nu}^\dagger \right) e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}},$$

donde

$$g_{\mathbf{q}, \mathbf{G}, \nu} = ie \sqrt{\frac{N\hbar}{2m\omega_{\mathbf{q}\nu}}} (\mathbf{q} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu} V_{\mathbf{q} + \mathbf{G}}.$$

Interacción electrón-fonón

Potencial electrón-fonón

Es más útil trabajar en la representación de momentos, por lo que transformaremos Fourier la expresión.

Por último, reemplazando la expresión en segunda cuantización de la densidad electrónica, llegamos al resultado final:

$$V_{e-f} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{q}\nu} \sum_{\mathbf{G}} g_{\mathbf{q},\mathbf{G},\nu} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \left(\hat{a}_{\mathbf{q}\nu} + \hat{a}_{-\mathbf{q}\nu}^\dagger \right),$$

donde

$$g_{\mathbf{q},\mathbf{G},\nu} = ie \sqrt{\frac{N\hbar}{2m\omega_{\mathbf{q}\nu}}} (\mathbf{q} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu} V_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}.$$

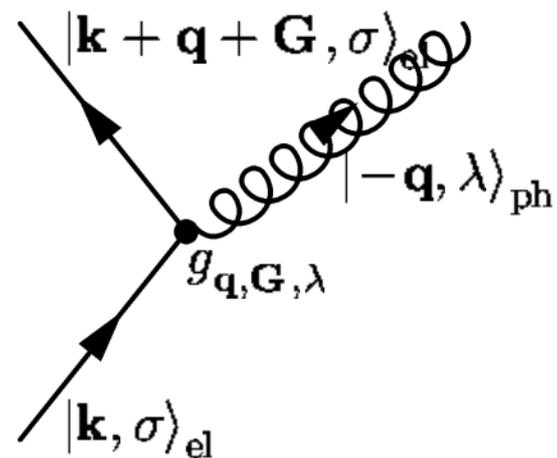
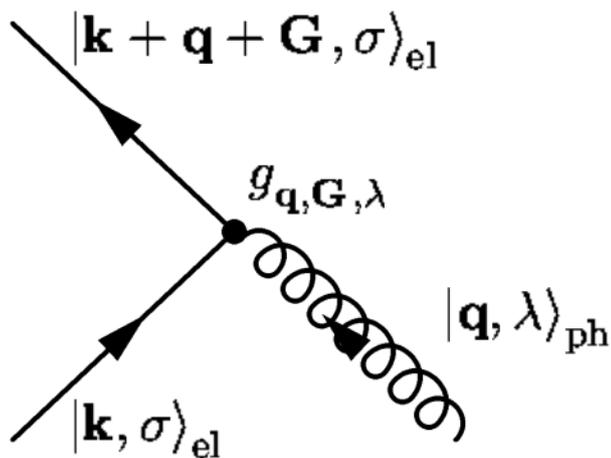
Interacción electrón-fonón

Potencial electrón-fonón

Es más útil trabajar en la representación de momentos, por lo que transformaremos Fourier la expresión.

Por último, reemplazando la expresión en segunda cuantización de la densidad electrónica, llegamos al resultado final:

$$V_{e-f} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{q}\nu} \sum_{\mathbf{G}} g_{\mathbf{q},\mathbf{G},\nu} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}+\mathbf{G},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \left(\hat{a}_{\mathbf{q}\nu} + \hat{a}_{-\mathbf{q}\nu}^\dagger \right),$$



Interacción electrón-fonón

Algunas simplificaciones

Solo consideraremos procesos “normales” ($\mathbf{G} = 0$), ya que son los dominantes.

$$g_{\mathbf{q},\mathbf{G},\nu} = ie \sqrt{\frac{N\hbar}{2m\omega_{\mathbf{q}\nu}}} (\mathbf{q} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu} V_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}$$

$$\approx ie \sqrt{\frac{N\hbar}{2m\omega_{\mathbf{q}\nu}}} \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu} V_{\mathbf{q}}$$

Interacción electrón-fonón

Algunas simplificaciones

Solo consideraremos procesos “normales” ($\mathbf{G} = 0$), ya que son los dominantes.

Además nos concentraremos en materiales isótropos, donde la polarización de los fonones es paralela o perpendicular a \mathbf{q} , i.e. solo las polarizaciones longitudinales contribuyen al acoplamiento. Así, a bajas temperaturas, solo el modo acústico longitudinal contribuye.

$$g_{\mathbf{q},\mathbf{G},\nu} \approx ie \sqrt{\frac{N\hbar}{2m\omega_{\mathbf{q}\nu}}} \mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu} V_{\mathbf{q}} = ie \sqrt{\frac{N\hbar}{2m\omega_{\mathbf{q}}}} q V_{\mathbf{q}}$$

Interacción electrón-fonón

Algunas simplificaciones

Solo consideraremos procesos “normales” ($\mathbf{G} = 0$), ya que son los dominantes.

Además nos concentraremos en materiales isótropos, donde la polarización de los fonones es paralela o perpendicular a \mathbf{q} , i.e. solo las polarizaciones longitudinales contribuyen al acoplamiento. Así, a bajas temperaturas, solo el modo acústico longitudinal contribuye.

Por último, teniendo en cuenta el apantallamiento presente, podemos aproximar al potencial Coulombiano por el de Yukawa,

$$V_{\mathbf{q}} = \frac{Ze}{\epsilon_0} \frac{1}{q^2 + k_{\text{TF}}^2}.$$

Interacción electrón-fonón

Algunas simplificaciones

Finalmente, obtenemos en este caso:

$$V_{e-f} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{q}} g_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \left(\hat{a}_{\mathbf{q}} + \hat{a}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right),$$

$$\text{con } g_{\mathbf{q}} = i \frac{Ze^2}{\epsilon_0} \frac{q}{q^2 + k_{\text{TF}}^2} \sqrt{\frac{N\hbar}{2m\omega_{\mathbf{q}}}}.$$

Interacción efectiva

Interacción efectiva electrón-electrón

El sistema completo que queremos resolver está compuesto por los electrones y los fonones, que interactúan entre sí, más la interacción electrón-electrón.

Fröhlich escribió el hamiltoniano explícitamente:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q} \\ \sigma_1 \sigma_2}} \frac{V_{\mathbf{q}}}{2V} \hat{c}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2\sigma_2} \hat{c}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}$$
$$+ \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{q}} g_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} \left(\hat{a}_{\mathbf{q}} + \hat{a}_{-\mathbf{q}}^\dagger \right)$$

Interacción efectiva

Interacción efectiva electrón-electrón

El sistema completo que queremos resolver está compuesto por los electrones y los fonones, que interactúan entre sí, más la interacción electrón-electrón.

¿Cómo podemos simplificar el problema sin hacerlo trivial?

Una posibilidad es “integrar” los fonones, haciéndolos desaparecer de la expresión, pero dejando su influencia manifestarse a través de una interacción “efectiva” entre los electrones.

Una manera de llevar a cabo esta “integración” es mediante una transformación canónica.

Interacción efectiva

Transformación canónica

Definamos el hamiltoniano transformado,

$$\mathcal{H}' = e^{-\hat{S}} \mathcal{H} e^{\hat{S}}$$

con $\hat{S}^\dagger = -\hat{S}$ un operador a determinar.

Si escribimos de manera separada la parte libre y la interactuante

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_i$$

y suponemos que tanto \hat{S} como \mathcal{H}_i pueden ser considerados “pequeños”, entonces

$$e^{-\hat{S}} \mathcal{H} e^{\hat{S}} = \mathcal{H} + [\mathcal{H}, \hat{S}] + \frac{1}{2} [[\mathcal{H}, \hat{S}], \hat{S}] + \dots$$

Interacción efectiva

Transformación canónica

Definamos el hamiltoniano transformado,

$$\mathcal{H}' = e^{-\hat{S}} \mathcal{H} e^{\hat{S}}$$

con $\hat{S}^\dagger = -\hat{S}$ un operador a determinar.

Si escribimos de manera separada la parte libre y la interactuante

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_i$$

y suponemos que tanto \hat{S} como \mathcal{H}_i pueden ser considerados “pequeños”, entonces

$$e^{-\hat{S}} \mathcal{H} e^{\hat{S}} \approx \mathcal{H}_0 + [\mathcal{H}_0, \hat{S}] + \mathcal{H}_i + \frac{1}{2} \left[[\mathcal{H}_0, \hat{S}], \hat{S} \right] + [\mathcal{H}_i, \hat{S}]$$

Interacción efectiva

Transformación canónica

Para eliminar los fonones, pedimos que

$$\left[\mathcal{H}_0, \hat{S} \right] = -\mathcal{H}_i$$

(esta ecuación define al operador \hat{S}).

Al reemplazar en

$$e^{-\hat{S}} \mathcal{H} e^{\hat{S}} \approx \mathcal{H}_0 + \left[\mathcal{H}_0, \hat{S} \right] + \mathcal{H}_i + \frac{1}{2} \left[\left[\mathcal{H}_0, \hat{S} \right], \hat{S} \right] + \left[\mathcal{H}_i, \hat{S} \right]$$

se obtiene

$$e^{-\hat{S}} \mathcal{H} e^{\hat{S}} = \mathcal{H}_0 + \frac{1}{2} \left[\mathcal{H}_i, \hat{S} \right]$$

Interacción efectiva

Transformación canónica

Eligiendo el operador que elimina el término de interacción electrón-fonón, el hamiltoniano efectivo resulta

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} +$$
$$+ \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{q} \\ \sigma_1 \sigma_2}} \left[\frac{2|g_{\mathbf{q}}|^2 \hbar \omega_{\mathbf{q}}}{(\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}})^2 - \hbar^2 \omega_{\mathbf{q}}^2} + \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{\text{TF}}^2} \right] \times$$
$$\times \hat{c}_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} \hat{c}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}$$

iSi $|\varepsilon_{\mathbf{k}_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}}| < \hbar \omega_{\mathbf{q}}$ **el potencial es atractivo!**

Inestabilidad de Cooper

El proyecto de inicio más famoso

En 1956, León Cooper, postdoc de Bardeen, comenzó a trabajar en un proyecto simple (“*warm-up project*”) para iniciar su trabajo de investigación.

Si existe una fuerza atractiva entre electrones, ¿es posible que se formen estados “ligados”?

¿Cuán intensa debe ser la interacción?

¿Hay algo que desestabilice la siempre presente superficie de Fermi?

Inestabilidad de Cooper

El proyecto de inicio más famoso

Cooper pensó en dos electrones que se agregan al sistema electrónico completo hasta la energía de Fermi.

Los electrones agregados interactúan entre si, pero no con el mar de Fermi.

Los electrones del mar de Fermi solo influyen en el estado final al limitar el espacio de fases por el principio de exclusión.

¿Qué tipo de estado forma el par?

Inestabilidad de Cooper

El proyecto de inicio más famoso

Llamemos $|FS\rangle$ al estado con todos los niveles completos hasta la energía de Fermi.

Imaginemos que agregamos un par de electrones arriba de la energía de Fermi con momento neto nulo:

$$|\Psi\rangle = \Lambda^\dagger |FS\rangle$$

$$\Lambda^\dagger = \int d\mathbf{r}d\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')$$

Inestabilidad de Cooper

El proyecto de inicio más famoso

Llamemos $|FS\rangle$ al estado con todos los niveles completos hasta la energía de Fermi.

Imaginemos que agregamos un par de electrones arriba de la energía de Fermi con momento neto nulo:

$$|\Psi\rangle = \Lambda^\dagger |FS\rangle$$

O pasando a Fourier $\Lambda^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$

donde $\phi_{\mathbf{k}} = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \phi(\mathbf{r})$.

Inestabilidad de Cooper

El proyecto de inicio más famoso

Las propiedades del par, y del superconductor que eventualmente dará origen, están definidas por la función de onda $\phi_{\mathbf{k}}$.

En la teoría BCS, la misma es “tipo s”, isótropa i.e. con simetría esférica.

No es la única opción y de hecho, en un creciente número de casos, nuevos tipos de emparejamiento anisotrópico se observan en los nuevos compuestos que se descubren. Así se suele hablar de superconductividad tipo p, d, etc.

Inestabilidad de Cooper

Energía de un par de Cooper

Calculemos la energía, con

$$|\Psi\rangle = \Lambda^\dagger |FS\rangle = \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \phi_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |FS\rangle \equiv \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \phi_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}_{\text{par}}\rangle$$

y

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \hat{V}$$

Recordemos que el potencial actúa solo entre los electrones del par. Los electrones del mar de Fermi son “inertes”, su presencia se manifiesta por el principio de exclusión.

Inestabilidad de Cooper

Energía de un par de Cooper

Energía cinética

$$\sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{|\mathbf{k}'| > k_F} \varepsilon_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger |FS\rangle$$

Para resolver esta expresión, notemos que si $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ podemos anticonmutar los operadores sin primar hacia la derecha, para obtener

$$\sum_{|\mathbf{k}'| > k_F} \phi_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} |FS\rangle =$$

$$= \sum_{|\mathbf{k}'| > k_F} \phi_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger E_0 |FS\rangle = E_0 \sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \phi_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}_{\text{par}}\rangle$$

Inestabilidad de Cooper

Energía de un par de Cooper

Energía cinética

$$\sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{|\mathbf{k}'| > k_F} \varepsilon_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}'} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger |FS\rangle$$

Los otros términos no nulos corresponden a los casos $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, $\sigma = \uparrow$ y $\mathbf{k} = -\mathbf{k}'$, $\sigma = \downarrow$. Cada uno de ellos contribuye con un término

$$\sum_{|\mathbf{k}| > k_F} \varepsilon_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}_{\text{par}}\rangle$$

Inestabilidad de Cooper

Energía de un par de Cooper

Juntando todo, tenemos

$$\hat{H}|\Psi\rangle = \sum_{|\mathbf{k}|>k_F} (E_0 + 2\varepsilon_{\mathbf{k}})\phi_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}_{\text{par}}\rangle +$$
$$+ \sum_{|\mathbf{k}|,|\mathbf{k}'|>k_F} |\mathbf{k}_{\text{par}}\rangle \langle \mathbf{k}_{\text{par}} | \hat{V} | \mathbf{k}'_{\text{par}} \rangle \phi_{\mathbf{k}'}$$

Si el estado del par ha de ser un autoestado,

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle = E \sum_{|\mathbf{k}|>k_F} \phi_{\mathbf{k}}|\mathbf{k}_{\text{par}}\rangle$$

Inestabilidad de Cooper

Energía de un par de Cooper

Comparando término a término

$$(E - E_0)\phi_{\mathbf{k}} = 2\varepsilon_{\mathbf{k}}\phi_{\mathbf{k}} + \sum_{|\mathbf{k}'| > k_F} \langle \mathbf{k}_{\text{par}} | \hat{V} | \mathbf{k}'_{\text{par}} \rangle \phi_{\mathbf{k}'}$$

En este punto Cooper introdujo una simplificación clave. Notó que los elementos de matriz del potencial no dependen fuertemente del momento y así, para imitar el comportamiento del potencial efectivo electrón-electrón, supuso que

$$\langle \mathbf{k}_{\text{par}} | \hat{V} | \mathbf{k}'_{\text{par}} \rangle = \begin{cases} -V_0 & \text{si } \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F, \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_F < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{si no.} \end{cases}$$

Inestabilidad de Cooper

Energía de un par de Cooper

Por lo tanto, podemos poner

$$(E - E_0)\phi_{\mathbf{k}} = 2\varepsilon_{\mathbf{k}}\phi_{\mathbf{k}} - V_0 \sum_{|\mathbf{k}'|=k_F}^{k_F+k_D} \phi_{\mathbf{k}'}$$

Ó

$$\phi_{\mathbf{k}} = -\frac{V_0}{(E - E_0 - 2\varepsilon_{\mathbf{k}})} \sum_{|\mathbf{k}'|=k_F}^{k_F+k_D} \phi_{\mathbf{k}'}$$

Sumando en momento en ambos lados y simplificando la suma sobre la función de onda.

Inestabilidad de Cooper

Energía de un par de Cooper

Finalmente obtenemos la ecuación para la energía

$$1 = - \sum_{|\mathbf{k}|=k_F}^{k_F+k_D} \frac{V_0}{(E - E_0 - 2\varepsilon_{\mathbf{k}})}$$

Como la energía de Debye es mucho menor que la energía de Fermi, podemos pasar la suma a una integral y tomar la densidad de estados en el nivel de Fermi

$$1 = V_0 g(\varepsilon_F) \int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F + \hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon - (E - E_0)}$$

Inestabilidad de Cooper

Energía de un par de Cooper

Finalmente obtenemos la ecuación para la energía

$$1 = - \sum_{|\mathbf{k}|=k_F}^{k_F+k_D} \frac{V_0}{(E - E_0 - 2\varepsilon_{\mathbf{k}})}$$

Como la energía de Debye es mucho menor que la energía de Fermi, podemos pasar la suma a una integral y tomar la densidad de estados en el nivel de Fermi e integrar

$$1 = \frac{V_0 g(\varepsilon_F)}{2} \ln \left(\frac{2\varepsilon_F - (E - E_0) + 2\hbar\omega_D}{2\varepsilon_F - (E - E_0)} \right)$$

Inestabilidad de Cooper

Energía de un par de Cooper

Analicemos este resultado

$$\frac{2}{V_0 g(\varepsilon_F)} = \ln \left(\frac{2\varepsilon_F - (E - E_0) + 2\hbar\omega_D}{2\varepsilon_F - (E - E_0)} \right)$$

La energía $2\varepsilon_F + E_0$ es la energía del par sin interacciones más el mar de Fermi. Por lo tanto, la diferencia de energías con y sin interacciones nos da la “energía de ligadura” del par:

$E_l = 2\varepsilon_F + E_0 - E$. Cuando

$$V_0 g(\varepsilon_F) \ll 1 \implies E_l + 2\hbar\omega_D \approx 2\hbar\omega_D,$$

por lo tanto

Inestabilidad de Cooper

Energía de un par de Cooper

Cuando $V_0 g(\varepsilon_F) \ll 1$,

$$\frac{2}{V_0 g(\varepsilon_F)} = -\ln \left(\frac{E_l}{2\hbar\omega_D} \right)$$

Exponenciando,

$$E_l = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{2}{V_0 g(\varepsilon_F)}}$$

No importa cuan pequeña sea la interacción, siempre se formará un estado ligado. Este estado se conoce como par de Cooper.

Función de onda

Función de onda de Schrieffer

Después del descubrimiento de Cooper, el grupo trabajó intensamente buscando una función de onda candidato para el estado fundamental de la SC.

Esta vez fue el aporte del estudiante de doctorado, Robert Schrieffer, lo que guió el desarrollo del trabajo.

Propuso que el estado fundamental es un estado coherente de pares de Cooper

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

Función de onda

Función de onda de Schrieffer

Esta solución es singular, porque los estados coherentes *mezclan estados con distinto número de partículas*.

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

Esto significa que el número de electrones fluctúa. El estado fundamental SC no está formado por un número constante de pares.

¿Qué hamiltoniano da origen a un estado tan particular?

La respuesta surge generalizando el estudio inicial de Cooper.

Teoría BCS

Hamiltoniano BCS

El hamiltoniano propuesto es el siguiente:

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

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

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -g_0/V & \text{si } |\xi_{\mathbf{k}}|, |\xi_{\mathbf{k}'}| < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{si no.} \end{cases}$$

Fin de la clase

¡Muchas gracias!