BCS alapáll. energia

Globális mértékinvariancia

$G(\varphi): \; c^{+}_{k\sigma} \mapsto e^{i\varphi} c^{+}_{k\sigma} \quad \forall k,\sigma$

zárt rendszer H-ja invariáns G-vel szemben ($c^{+}c$ párokban)

megőrzi N-et

Fermi alapállapot $\quad |F\rangle = \prod_{\substack{k<k_F \\ \sigma}} c^{+}_{k\sigma}|0\rangle \mapsto e^{iN\varphi}|F\rangle$

saját konstanssal, ugyanaz az állapot

BCS alapállapot $|\Psi_G\rangle = \prod (u_k + v_k c^{+}_{k\uparrow} c^{+}_{-k\downarrow})|0\rangle$

$G(\varphi): \{u_k, v_k\} \mapsto \{u_k, e^{2i\varphi} v_k\} \equiv |\Psi_G(2\varphi)\rangle$

Más állapot. Megmutatható: $\langle \Psi_G(\varphi)|\Psi_G(\varphi')\rangle = \delta(\varphi-\varphi')$

Ortogonálisak, de mivel H invariáns G-re $|\Psi_G(\varphi)\rangle$-k degeneráltak

k-függő φ_k?! $\quad \{u_k, e^{i\varphi_k} v_k\}$

$\rightsquigarrow$ rendparaméter fázisa helyfüggő $\rightsquigarrow$ $J_s \propto \nabla\varphi(\underline{r})$

szupravezető folyik $\rightsquigarrow$ gerjesztett állapot

"Fázismerevség" (P.W. Anderson) energiába kerül a szupravezető fázisát lokálisan megváltoztatni

(2002.)

BCS alapállapot

$$|\Psi_G\rangle = \prod_k \left(u_k + v_k \, c^\dagger_{k\uparrow} c^\dagger_{-k\downarrow} \right) |0\rangle$$ vákuum

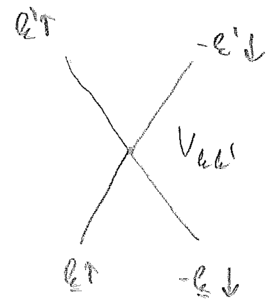
$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 0$ Feladat: alapállapoti u_k, v_k, E

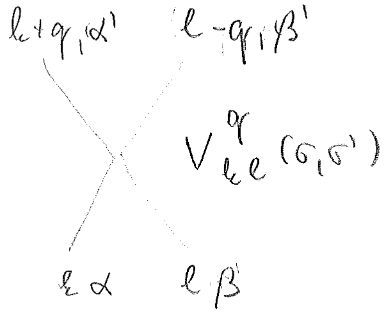
Milyen $\{u_k, v_k\}$ fv. minimalizálja az energiát?

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma} + \sum_{kk'} V_{kk'} c^\dagger_{k\uparrow} c^\dagger_{-k\downarrow} c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$$

Általános alak:

$$\sum$$





anticipáljuk, hogy ez a kölcsönhatás lesz fontos a szupravezetés szempontjából

$\langle \Psi_G | H - \mu \hat{N} | \Psi_G \rangle$ minimumát keressük

$\mu = \varepsilon_F$ kémiai potenciál $\hat{N} = \sum_{k\sigma} c^\dagger_{k\sigma} c_{k\sigma}$ részecskeszám op.

$\xi_k = \varepsilon_k - \varepsilon_F$; $\rightsquigarrow$ $K.E. - \mu \hat{N} = \sum_{k\sigma} \xi_k c^\dagger_k c_k$

$$\delta \langle \Psi_G | \left(\sum_{k\sigma} \xi_k c^\dagger_k c_k + \sum_{kk'} V_{kk'} c^\dagger_{k\uparrow} c^\dagger_{-k\downarrow} c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \right) | \Psi_G \rangle = 0$$

$\langle n_{k\sigma} \rangle = |v_k|^2$ $\rightsquigarrow$ $\langle KE - \mu N \rangle = 2 \sum_k \xi_k |v_k|^2$

$$\langle V\rangle = \sum_{kk'} V_{kk'}\, u_k v_k^* u_{k'}^* v_{k'}$$

$$\begin{array}{ccc} \mathrm{I} & & \mathrm{F} \\ (k'\uparrow, -k'\downarrow) & \xrightarrow{V_{kk'}} & (k\uparrow, -k\downarrow) \end{array}$$

amplitúdó $\quad u_k v_{k'}$ (k üres, k' teli) $\qquad v_k^* u_{k'}^*$ (k teli, k' üres)

$$\langle H-\mu\hat{N}\rangle = 2\sum \xi_k |v_k|^2 + \sum_{kk'} V_{kk'}\, u_k v_k^* u_{k'}^* v_{k'}$$

u_k, v_k valós

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad\to\quad u_k = \sin\vartheta_k \quad v_k = \cos\vartheta_k$$

$$\langle H-\mu\hat{N}\rangle = \sum_k \xi_k (1+\cos 2\vartheta_k) + \frac{1}{4}\sum_{kk'} V_{kk'} \sin 2\vartheta_k \sin 2\vartheta_{k'}$$

$$\frac{\partial}{\partial\vartheta_k}\langle H-\mu\hat{N}\rangle = 0 = -2\xi_k \sin 2\vartheta_k + \sum_{k'} V_{kk'} \cos 2\vartheta_k \sin 2\vartheta_{k'}$$

$$(*) \quad \boxed{\operatorname{tg} 2\vartheta_k = \frac{\sum_{k'} V_{kk'} \sin 2\vartheta_{k'}}{2\xi_k}} \quad \text{integrálegyenlet } \vartheta_k\text{-ra}$$

Bevezetünk két segédmennyiséget:

(rendparaméter) $\quad \Delta_k = -\sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'} = -\frac{1}{2}\sum_{k'} V_{kk'} \sin 2\vartheta_{k'}$

(kvázirészecske energia) $\quad E_k = \sqrt{\Delta_k^2 + \xi_k^2} \quad \Big| \quad (*) \quad \operatorname{tg} 2\vartheta_k = -\frac{\Delta_k}{\xi_k}$

azaz
$$2u_k v_k = \sin 2\vartheta_k = \frac{\Delta_k}{E_k} \quad \text{(páramplitúdó)}$$

$$v_k^2 - u_k^2 = \cos 2\vartheta_k = -\frac{\xi_k}{E_k}$$

$$\sin 2\alpha = \pm\frac{\operatorname{tg} 2\alpha}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2 2\alpha}} \qquad \cos 2\alpha = \pm\frac{1}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2 2\alpha}}$$

Előjel konvenció: $v_k^2 \to 0$, ha $\xi_k \to \infty$

Δ_k definíciójába visszahelyettesítjük $\sin 2\vartheta_k$-t:

$$\Delta_k = -\frac{1}{2}\sum_{k'} V_{kk'}\frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}}$$

$$\boxed{\Delta_k = -\frac{1}{2}\sum_{k'}\frac{\Delta_{k'}}{\sqrt{\Delta_{k'}^2+\xi_{k'}^2}}V_{kk'}}$$ "gap-egyenlet"

1.) Triviális megoldás: $\Delta_k \equiv 0$

$$\rightsquigarrow 2u_k v_k = \frac{\Delta_k}{E_k} = 0$$

$$v_k^2 - u_k^2 = -\frac{\xi_k}{\sqrt{\xi_k^2}} = -\operatorname{sgn}\xi_k = \begin{cases} -1, & \text{ha } \xi_k > 0 \rightsquigarrow u_k = 1,\ v_k = 0 \\ +1, & \text{ha } \xi_k < 0 \rightsquigarrow v_k = 1,\ u_k = 0 \end{cases}$$

Fermi alapállapot

2.) Nemtriviális megoldás lehet, ha V negatív

Modell potenciál

$$V_{kk'} = \begin{cases} -V & \text{, ha } |\xi_k|, |\xi_{k'}| \le \hbar\omega_c \\ 0 & \text{egyébként} \quad (V>0 \text{ konst.}) \end{cases}$$

$$\Delta_k = \begin{cases} \Delta & \text{, ha } |\xi_k| < \hbar\omega_c \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases}$$

$$\Delta = \Delta \frac{V\mathcal{N}(0)}{2}\int_{-\hbar\omega_c}^{\hbar\omega_c}\frac{d\xi}{E}$$

$$1 = \frac{V\mathcal{N}(0)}{2}\int_{-\hbar\omega_c}^{\hbar\omega_c}\frac{d\xi}{\sqrt{\Delta^2+\xi^2}}$$

$$\frac{\cancel{2}1}{V\mathcal{N}(0)} = \cancel{2}\ \operatorname{arsh}\frac{\hbar\omega_c}{\Delta}$$

$$\operatorname{sh}\frac{1}{V\mathcal{N}(0)} = \frac{\hbar\omega_c}{\Delta}$$

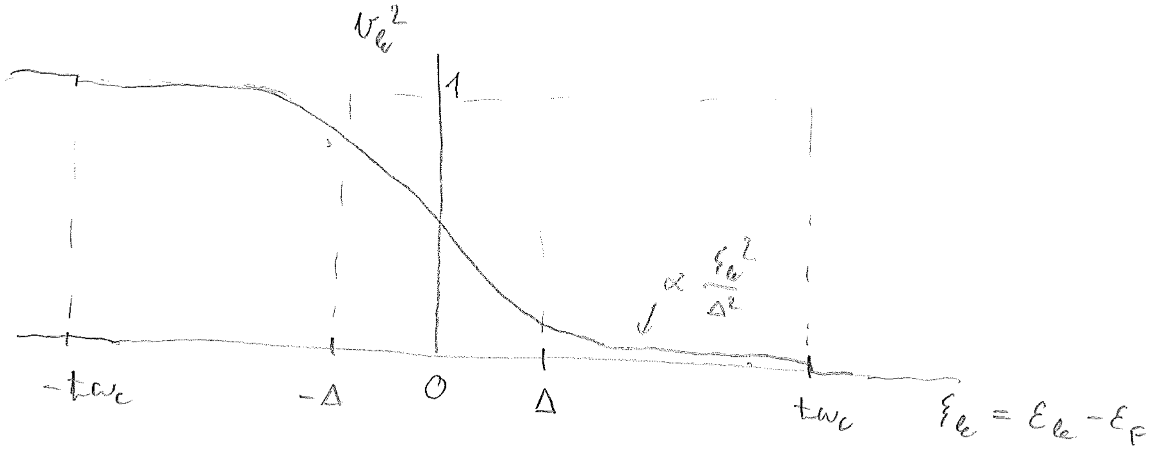
$V\mathcal{N}(0) \ll 1$ (gyenge csatolás)

$$\frac{1}{2} e^{\frac{1}{V\mathcal{N}(0)}} = \frac{\hbar\omega_c}{\Delta} \rightsquigarrow \boxed{\Delta = 2\hbar\omega_c e^{-\frac{1}{V\mathcal{N}(0)}}}$$

$$u_k^2 + v_k^2 = 1$$

$$v_k^2 - u_k^2 = -\frac{\xi_k}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_k^2}}$$

$$\boxed{\left\{ \begin{matrix} v_k^2 \\ u_k^2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2}\left(1 \mp \frac{\xi_k}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_k^2}}\right)}$$



.. $\Delta \approx k_B T_c \rightsquigarrow$ hasonlít a Fermi-fv.-re

Alapállapoti energia

$$\langle H-\mu\hat N\rangle = 2\sum_k \xi_k v_k^2 + \sum_{kk'} V_{kk'}\, u_k v_k u_{k'} v_{k'}$$

Fermi-felület környékén: $\xi_k = \hbar v_F(|k|-k_F)$ el.-lyuk szim.

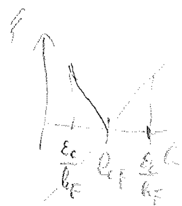
1. tag (KE) $= \sum_k \left(\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k}\right)$

2. tag $\langle V\rangle = \sum_k u_k v_k \underbrace{\sum_{k'} V_{kk'} u_{k'} v_{k'}}_{-\Delta_k}$

$$= -\frac{\Delta}{V}\underbrace{\sum_{\substack{k'\\ |\xi_k|<\hbar\omega_c}} V u_k v_k}_{\Delta} = -\frac{\Delta^2}{V}$$

Normál áll: $\langle V\rangle = 0$, mert $u_k v_k = 0$

Normál alapállapot: $\langle H-\mu N\rangle_n = \sum_{k<k_F} 2\xi_k$



$$E_S - E_N = \underbrace{\sum_{k>k_F}\left(\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k}\right) + \sum_{k<k_F}\left(-\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k}\right)}_{\Delta E_{kin}} - \underbrace{\frac{\Delta^2}{V}}_{\Delta E_{pot}}$$

$\xi_k > \hbar\omega_c \rightsquigarrow \Delta E_{kin} \equiv 0$

$\hbar\omega_c \ll \varepsilon_F$

$\xi_k \to -\xi_k$

$k<k_F \to k>k_F$

$$= 2\sum_{k>k_F}\underbrace{\left(\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k}\right)}_{\hbar\omega_c \text{ fölött } 0} - \frac{\Delta^2}{V}$$

$$\boxed{\frac{1}{\mathcal N(0)V} = \operatorname{Arsh}\left(\frac{\hbar\omega_c}{\Delta}\right)}$$

$$\Delta E_{kin} = 2\mathcal N(0)\int_0^{\hbar\omega_c}\left(\xi - \frac{\xi^2}{\sqrt{\Delta^2+\xi^2}}\right)d\xi$$

Táblázatból: $\int \frac{x^2}{\sqrt{a^2+x^2}}\,dx = \frac{1}{2}x\sqrt{a^2+x^2} - \frac{a^2}{2}\operatorname{Arsh}\left(\frac{x}{a}\right)$

$$\Delta E_{kin} = \mathcal N(0)(\hbar\omega_c)^2 - \mathcal N(0)\hbar\omega_c\underbrace{\sqrt{\Delta^2+(\hbar\omega_c)^2}} + \underbrace{\Delta^2\mathcal N(0)\operatorname{Arsh}\left(\frac{\hbar\omega_c}{\Delta}\right)}_{\frac{\Delta^2}{V}}$$

Gyenge csatolás:

$\Delta \ll \hbar\omega_c$: $\sqrt{\Delta^2+(\hbar\omega_c)^2} \simeq \hbar\omega_c\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_c}\right)^2\right]$

$$\Delta E_{kin} = \left[\frac{\Delta^2}{V} - \frac{1}{2}\mathcal N(0)\Delta^2\right]$$

$$|\xi_k| > \hbar\omega_c \rightsquigarrow \Delta = 0 \rightsquigarrow \cancel{E_k = \xi_k} \rightsquigarrow \Delta E_{kin} = 0$$

$k > k_F \qquad \xi_k - |\xi_k| = 0$

$k < k_F \qquad -\xi_k - |\xi_k| = 0$

$\rightsquigarrow$ ~~az összeghez~~ ΔE_{kin}-hez csak $|\xi_k| < \hbar\omega_c$-re kapunk járulékot

$$\Delta E_{kin} = N(0) \int_{-\hbar\omega_c}^{0} \left(-\xi - \frac{\xi^2}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} \right) d\xi + \int_{0}^{\hbar\omega_c} \left(\xi - \frac{\xi^2}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} \right) d\xi =$$

$$= 2N(0) \int_{0}^{\hbar\omega_c} \left(\xi - \frac{\xi^2}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} \right) d\xi$$

$$\int \frac{x^2}{\sqrt{a^2 + x^2}}\, dx = \frac{1}{2} x \sqrt{a^2 + x^2} - \frac{a^2}{2} \operatorname{arsh}\left(\frac{x}{a}\right)$$

$$\Delta E_{kin} = N(0)(\hbar\omega_c)^2 - N(0)\hbar\omega_c \sqrt{\Delta^2 + (\hbar\omega_c)^2} + \underbrace{N(0)\Delta^2 \underbrace{\operatorname{arsh}\left(\frac{\hbar\omega_c}{\Delta}\right)}_{= \frac{1}{N(0)V}}}_{\Delta^2/V}$$

Gyenge csatolás: $\hbar\omega_c \gg \Delta$

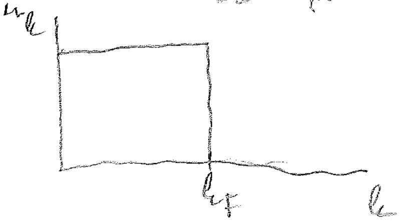
$$\sqrt{\Delta^2 + (\hbar\omega_c)^2} \approx \hbar\omega_c \left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_c}\right)^2 \right]$$

$$\Delta E_{kin} = \frac{\Delta^2}{V} - \frac{1}{2} N(0)\Delta^2 \qquad \Delta E_{pot} = -\frac{\Delta^2}{V}$$

$$\boxed{\Delta E = -\frac{1}{2} N(0) \Delta^2} < 0$$

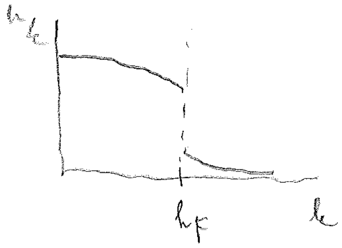
$\rightsquigarrow$ ~~normális~~ BCS-nek kisebb az energiája, mint a normál állapotnak!

Betöltési számok nulla hőmérsékleten

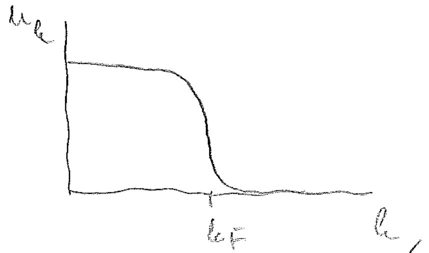


„Fermi-felület instabilitás”

Fermi-folyadék



BCS



nem Fermi-folyadék

$$\Delta E = E_S - E_N = \underbrace{\left[\overset{>0}{\frac{\Delta^2}{V}} - \frac{1}{2}\mathcal{N}(0)\Delta^2\right]}_{>0} - \underbrace{\frac{\Delta^2}{V}}_{<0} = -$$

$$\boxed{E_S - E_n = -\frac{1}{2}\mathcal{N}(0)\Delta^2}$$

kondenzációs energia
$T=0$ hőmérsékleten

$$E_S - E_N = \frac{1}{2\mu_0} B_c(0)^2 \qquad B_c \propto \Delta$$