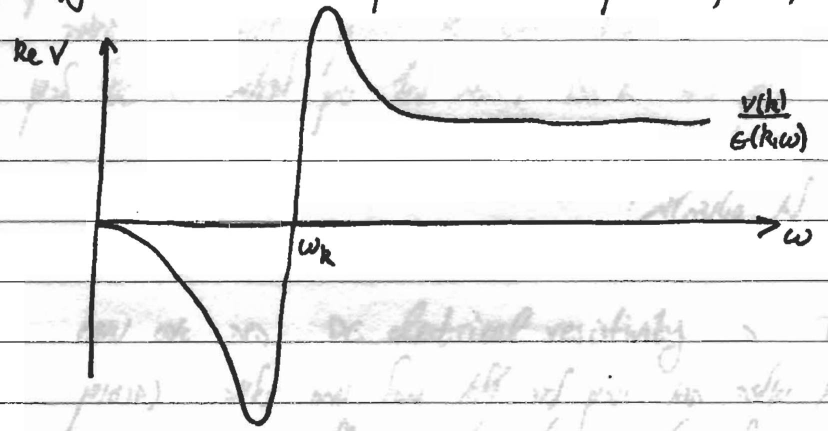
האינטראקציה שחווים האלקטרונים היא סכום האינטראקציה הקולומבית הממוסכת והאינטראקציה המושרית על ידי הפונונים. מתוך הביטוי אנו רואים כי רק זה הוא מושך ($V<0$) עבור $\omega<\omega_k$ (תדר קטן מ-ω_k). אם מבינים באינטראקציה הזו כמעבר של $\hbar\omega$ energy transfer בין האלקטרונים עבור k נתון נקבל



מה מקור משיכה אפקטיבית זו? אלקטרון החולף בגביש נוטה למשוך אליו את היונים החיוביים. בגלל שמסת היונים גדולה בהרבה ממסת האלקטרונים הם נעים לאט הרבה יותר מהאלקטרונים ונוצר אזור המטען העודף החיובי

בשובל האלקטרון החולף נותר עוד רב זמן לאחר שהאלקטרון נע. זה את הסביבה, אלקטרון אחר המגיע לסביבה זו ימשך למקום זה מכיוון שהוא מרגיש אזור חיובי בתנאים אלה אינטראקציה עם הרקע החיובי. האינטראקציה המושרית הינה retarded interaction היא תלויה ב-ω כתוצאה מהזמן הנדרש ליונים להגיב לתנועתו של האלקטרון המקורי.

הזמן הנדרש ליונים להגיב לתנועת האלקטרון $\tau\sim\frac{2\pi}{\omega_D}\sim10^{-13}\,sec$

בזמן זה האלקטרון הראשון נע $v_F\tau\sim10^{8}\cdot\frac{cm}{sec}\cdot10^{-13}\,sec\sim1000\,Å$

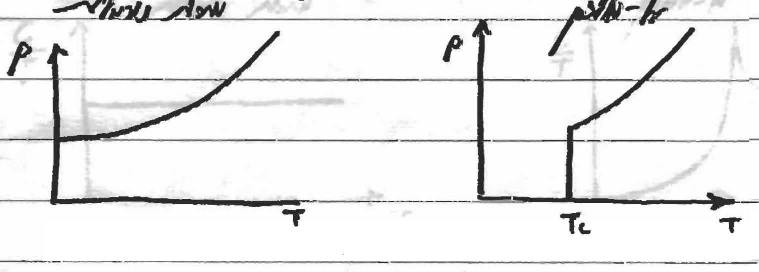
מתברר כי משיכה אפקטיבית זו בין אלקטרונים, כאשר היא מתגברת על הדחייה החשמלית ביניהם, מובילה לאחת מהתופעות האלקטרוניות המעניינות ביותר - על מוליכות.

על מוליכות התגלתה ב 1911 במעבדתו של Kamerlingh Onnes בליידן כאשר תלמיד המעבדה שהועסק כדי לבדוק את הנושא שם לב כי ההתנגדות החשמלית של כספית נעלמה כמעט כאשר הטמפרטורה הייתה נמוכה מ 4K. למרות שטובי הפיזיקאים עסקו בנושא במשך שנות ה 30 וה 40 של המאה הקודמת, המנגנון המיקרוסקופי לתופעה התגלה רק ב 1957

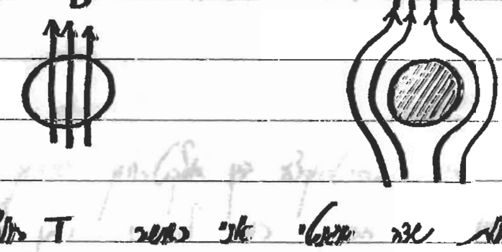
ע"י Bardeen Cooper and Schrieffer (BCS). על מוליכות עמוקה ומדויקת
באופן אינטואיטיבי ביותר בעזרת הדמיון הבסיסי הזה בלבד. אולי נראה של שימושים ובשרים. עד 1986
הטמפרטורה הקריטית, בה התחולל המעבר, הייתה לכל היותר כ- 23K (בסיס של ניוביום)
ב 1986 Bendorz ו- Mueller גילו סוג חדש של חומרים שעבורו T_c גבוהה
בהרבה. כאשר T_c המקסימלי הידוע היום הוא 135K (תחת לחץ ניתן להעלות עד אף לכיוון 150K)

חומרים על מוליכים מגלים שלל התנהגויות לא סטנדרטיות:

1. אובדן ההתנגדות החשמלית, מתחת ל T_c ה DC electrical resistivity הינו אפס ממש. כך שאין לנו אפשרות ערך שנורה לזרם על מוליך הוא יכול לזרום ללא מגבלה ממש נצחי (בעקרון) ~~ככל~~ נקבל זרמים persistent currents שאלו על פני תקופות של שנים ללא הנחתה הנראית למדידה של הזרם.

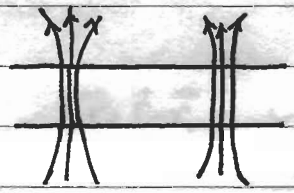


2. דיאמגנטיזם מושלם: על-מוליך דוחה מתוכו שדה מגנטי חלש - על פני שכבה עם מתרחשים זרמים המייצרים שדה מגנטי המבטל את השדה החיצוני בתוך החומר. זרמים אלה זורמים על פני שכבה של כ 100-1000Å משפת העל-מוליך.



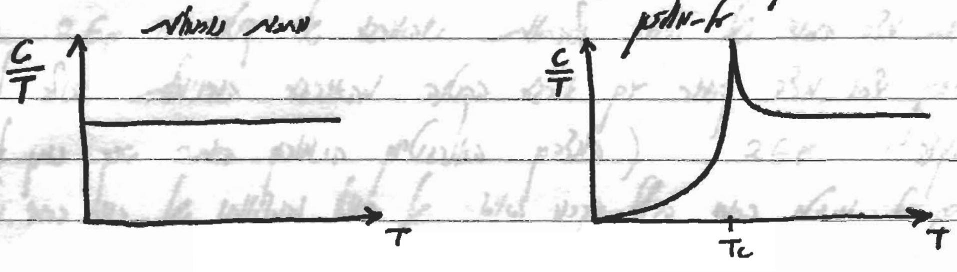
אפקט Meissner: אם עקרונית אינו תלוי בעוצמת שדה מגנטי אלא כאשר T יורד מתחת ל T_c
החומר הופך לעל-מוליך דוחה מתוכו את השדה המגנטי. שימו לב כי יש הבדל בין תופעה
זו לבין מוליך מושלם שבו ההתנגדות החשמלית מתאפסת - אם אולם שדה מגנטי הופעל מראש
מעבר כי זרמים המושרים מתנגדים לשינוי שיבטלו את השדה הפנימי אך אם היה שדה מגנטי
חיצוני כאשר החומר הפך למוליך מושלם התנגדות הוא לא ידחה השדה הפנימי כי לא היה אז
שינוי. באפקט Meissner העל-מוליך דוחה השדה לשינוי שאין לו כזה.

מעל שדה מגנטי קריטי על-מוליכות נהרסת בעל-מוליך Type 1. בחלק אחר
המצב את צורה של משטח בעל-מוליך Type 2 השדה המגנטי חודר את הדוגמא
לאורך שפופרות שהן מערבולות - vortices שבהן העל מוליכות נהרסת אך היא
מתקיימת מחוץ להן.



השטף דרך כל אחד מה vortices מקוונט
נתון ע"י $\phi_0 = \frac{hc}{2e}$

3. המצאות של פער אנרגטי בספקטרום: רוב התכונות התרמודינמיות של על-מוליכים דועכות אקספוננציאלית בטמפרטורות נמוכות כ $e^{-\frac{\Delta}{kT}}$ עובדה המרמזת על המצאות של פער אנרגטי בספקטרום. דוגמא החום הסגולי



בנוכחות פער רק למספר קטן אקספוננציאלית של חלקיקים אנרגיה מספקת כדי לעלות מעבר לפער. בנוסף לכך הפער נובע מהלחץ האלקטרומגנטי של על-מוליכים. ב $T=0$ הפער לא יופיע בעל-מוליך אולם אם כן האנרגיה של חצי שלה מ 2Δ - האנרגיה הדרושה לשבור חלקיק מעל לפער.

כבר בראשית שנות ה 50 של המאה הקודמת סומנה האינטראקציה בין אלקטרונים ופונונים כגורם לתופעת העל-מוליכות אך הסבר מיקרוסקופי עדיין היה חסר. כמה שנים לאחר מכן ניתן ע"י Leon Cooper שהראה כי ים פרמי אינו יציב כנגד יצירת זוגות קשורים של אלקטרונים במצבים אנטי-סימטריים מנוגדים - כאשר ככל שתהיה חלשה גם חלשה באופן הבא. בזוגות האלה של הולכה ויציבות של ים פרמי שכן אנו יודעים שאלו רק נה יצירת כל קשר בשל מצב אחד דורשת המשיכה באופן הבדל מתחת קריטי.

כדי לראות כיצד מתרחשת קשירה הזוג נחשוב קודם בעולם של שני אלקטרונים הנוספים
לים פרמי ב $T=0$. נניח כי חברי הזוג משפיעים זה על זה דרך אינטראקציה מושכת אך
עם האלקטרונים האחרים הם יודעים את ים פרמי - בין אלקטרונים אלה נניח העדר אינטראקציה.
ים פרמי מלא לכן תפקיד הנוסף מתבטא בעיקרון באיסור פאולי המונע מהזוג לאכלס מצבים בתוך הים.
משוואת שרדינגר לפונקציית הגל של הזוג $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\sigma_1,\sigma_2)$ היא:
בקואורדינטות מרכז המסה $\vec{R}=\frac{m_1\vec{r}_1+m_2\vec{r}_2}{m_1+m_2}$ והקואורדינטה היחסית: $\vec{r}=\vec{r}_1-\vec{r}_2$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\vec{\nabla}_R^2-\frac{\hbar^2}{2\underset{\uparrow}{M}}\vec{\nabla}_r^2+V(r)\right]\Psi(\vec{R},\vec{r},\sigma_1,\sigma_2)=E\,\Psi(\vec{R},\vec{r},\sigma_1,\sigma_2)$$

$$M=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$$

אנו מחפשים לחשב את מצב היסוד של הזוג ולהראות שהאנרגיה שלו קטנה מ $2\epsilon_F$. במצב כזה ברור כי האלקטרונים יצרו מצב קשור עם אנרגיה הקטנה מהאנרגיה המינימלית שיכולה להיות לזוג ללא האינטראקציה: $2\epsilon_F$. (המצבים האנרגטיים הנמוכים ביותר בהם ניתן לשכן את האלקטרונים נמצאים על משטח פרמי בגלל עקרון האיסור של פאולי והמלאות של כדור פרמי מלא)

הפונקציה נראית להפרדת משתנים

$$\Psi(\vec{R},\vec{r},\sigma_1,\sigma_2)=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}\,\phi(\vec{r})\,\chi(\sigma_1,\sigma_2)$$

בהתאם לעובדה שהחלק התלוי ב $\vec{R}$ בהמילטוניאן הינו חופשי. ברור כי מצב היסוד הוא זה שעבורו $K=0$ ונניח זאת מעתה והלאה.
פונקציית הגל Ψ נדרשת להיות אנטי סימטרית תחת החלפת שני האלקטרונים. לכן אם $\chi(\sigma_1,\sigma_2)$ אי זוגית תחת החלפת σ_1 ו σ_2 $\phi(r)$ צריכה להיות סימטרית תחת $\vec{r}\to-\vec{r}$, ולהפך אם χ זוגית. אנו מניחים כי $V(r)$ מתאר פוטנציאל מושך התלוי רק ב r ולכן הגל ירצה יותר אנרגיה אם ϕ תהא גדולה עבור r קטנים ולכן תעדיף להיות זוגית. במקרה זה נקבל ש χ מתאר סינגלט $\chi=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)$.

נפתח את $\phi(r)$ בגלים מישוריים

$$\phi(\vec{r})=\sum_{k>k_F}v_{\vec{k}}\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

כשלוקחים בחשבון באופן מפורש את איסור פאולי הטוען כי ϕ לא יכולה לאכלס מצבים מתחת ל ϵ_F: זה נובע מכך שאם נכתוב $\sum_{k_1,k_2}e^{i(k_1r_1+k_2r_2)}$ נוכל לרשום $\sum_{k_1,k_2}e^{i(k_1+k_2)R+i\frac{(k_1-k_2)}{2}r}$ ומכאן שלוקחים $k=k_1=-k_2$ נקבל הגבלה $k>k_F$.

נציב במשוואת שרדינגר ונכפול ב $e^{i\vec{k}'\vec{r}}$ (דהיינו נבצע אינטגרציה על המשוואה $\int e^{-i\vec{k}\vec{r}} d^3r$)
ונקבל

$$\left(E-2\epsilon_k\right) U_{\vec{k}} = \sum_{k'>k_F} V_{\vec{k}\vec{k}'} U_{\vec{k}'}$$

$$V_{\vec{k},\vec{k}'} = \frac{1}{\sqrt{V}} \int d^3r \, v(r) e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{r}}$$

כאשר $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}$!

כדי לפשט את הבעיה Cooper הניח אינטראקציה מאוד מפושטת

$$V_{\vec{k},\vec{k}'} = \begin{cases} -V & \xi_{\vec{k}}, \xi_{\vec{k}'} < \hbar\omega_c \\ 0 & \text{אחרת} \end{cases}$$

כאשר $\xi_k = \epsilon_k - \epsilon_F$! $\hbar\omega_c$ cut off energy. בדרך הכלל $\omega_c \sim \omega_D$ הסקלה שמעליה אין לנו פונונים כדי לבצע את האינטראקציה בין האלקטרונים.

$$\Leftarrow \quad U_{\vec{k}} = \frac{V}{2\epsilon_k - E} \cdot \sum_{\substack{k'>k_F \\ \xi_{k'}<\hbar\omega_c}} U_{\vec{k}'}$$

נסכם את שני אגפי המשוואה על $k > k_F$, $\xi_k < \hbar\omega_c$

$$\sum_{\substack{k>k_F \\ \xi_k<\hbar\omega_c}} U_{\vec{k}} = \sum_{\substack{k'>k_F \\ \xi_{k'}<\hbar\omega_c}} U_{\vec{k}'} \cdot \sum_{\substack{k>k_F \\ \xi_k<\hbar\omega_c}} \frac{V}{2\epsilon_k - E}$$

$$\Leftarrow \quad \frac{1}{V} = \sum_{\substack{k>k_F \\ \xi_k<\hbar\omega_c}} \frac{1}{2\epsilon_k - E}$$

נעבור לאינטגרציה על האנרגיה ϵ תוך שימוש בכך שצפיפות המצבים $g(\epsilon)$ ליד $\epsilon = \epsilon_F$ קבוע לאורך האינטגרל (קבוע כמעט ואין שינוי)

$$\frac{1}{V} = g(\epsilon_F) \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \hbar\omega_c} \frac{d\epsilon}{2\epsilon - E}$$

$$= \frac{1}{2} g(\epsilon_F) \ln\left(\frac{2\epsilon_F - E + 2\hbar\omega_c}{2\epsilon_F - E}\right)$$

נניח כי $2\epsilon_F - E$ חייב קטן (קיים מצב קשור) ובמקרה צימוד $Vg(\epsilon_F) \ll 1$

$$E \simeq 2\epsilon_F - 2\hbar\omega_c\, e^{-\frac{2}{g(\epsilon_F)V}}$$

שימו לב:

1. התוצאה קשורה עם פקטור אינטראקציה קטנה כרצוננו. כאשר $V\to 0$ $\Delta = 2\epsilon_F - E \to 0$
2. אנרגית הקשר Δ לא אנליטית ב-V לכן לא נוכל לקבל תוצאה זו בכל סדר בתורת ההפרעות. (תוצאה זו סיבלה את הטיפול התאורטי הזה במשך זמן רב)
3. לאינטראקציה $(2\epsilon_k - E)^{-1} = (2\xi_k + \Delta)^{-1}$ נשאר. באנרגיה כמו עם כמה אנרגית Δ של עירור המשתתפים ב pairing. הגבול עבור $Vg \ll 1$ מספיק לכן לקבוע ערך למודל V שהוצע. במקרה זה $\Delta \ll \omega_c$ והתלות של $V_{kk'}$ באנרגיות המקסימליות מראה גודל של Δ ו ϵ_F אינה תשובה במודל.
4. הגודל במרחב התנע של הזוג הינו לכן $\frac{v_F}{\Delta}$ וגודלו במרחב $\frac{\Delta}{v_F}$. גודל זה הינו כ $100-1000\text{Å}$ במתכות. לכן אם מודל זה אכן נכון כל-תוצאה במתכות משמעותית שמשנה רקע האלקטרונים במרחב.

מתוך תוצאות הבעיה של Cooper ברור כי אם קיימת משיכה אפקטיבית לשני אלקטרונים לאחר שנוצרות עם פרמי מלא ואינטראקציות מושכות, הרי ניתן לצפות שכל האלקטרונים ירצו ליצור זוגות כדי להקטין את האנרגיה שלהם. זהו חוסר-יציבות של ים פרמי. למרות שתוצאה זו נראית קוסמת, לא ברור כיצד ניתן בין מספר גדול של אלקטרונים ישפיע על האינטראקציה שבעזרה לזיהוי מתחילה, האם כל האלקטרונים בים פרמי ישתתפו? כיצד תהיה תלות חוסר היציבות בפרמטרים כטמפרטורה?

כדי לבחון את חוסר היציבות ונקשרה ל pairing נחשב ב susceptibility הקשורה אליו. אנו מצפים כי זו תתבדר עם המערכת, אך לא יציבה לבד מלבד בו האלקטרונים מצויים זה שבר. כדי לבחון את הנקודה נוסיף להמילטוניאן האלקטרוני-גבישי שלנו צימוד של שדה חיצוני בדיוני h_{pair} לאופרטור המייצר זוגות Cooper:

$$\hat{P} = \sum_k c^\dagger_{k\uparrow} c^\dagger_{-k\downarrow} + h.c$$

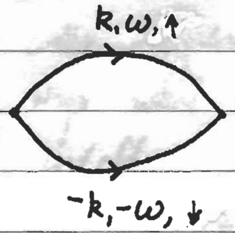
$$H_{pair} = h_{pair}\hat{P}$$

(שימו לב כי הגדרה אחרת $\hat{P} = \sum_{k\sigma} c^\dagger_{k\sigma} c^\dagger_{-k-\sigma}$ + h.c מובילה ל $\hat{P}=0$)

נשתמש ב linear responce theory כדי לחשב את $\langle \hat{P} \rangle$ בנוכחות הפרעה H_{pair}.

כיוון שהוא נתון ב χ_{pair}: $\langle \hat{P} \rangle = \chi_{pair} h_{pair}$

נראה כי $\chi_{pair} = G^R_{PP}$ ונחשב אותו

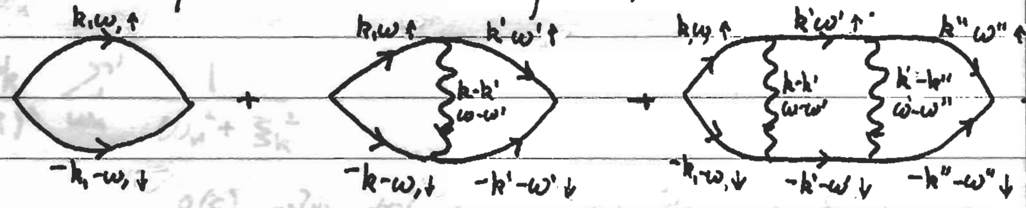
$\chi_{pair} = \sum_{k,\omega}$ 

$= + \sum_{k,\omega} G_0(k, i\omega)\, G_0(-k, i\omega)$

כיוון כי זהו הסימן הנכון מסדר האופרטורים לפי משפט Wick

שימו לב לכך שהגרף דומה המתאים לשני קווים וכן הגרף שקיבלנו לנו כבר בעת חישוב ה density-density corr. func. כמו כן כאן הסכום בשני הפרופגטורים הפוך בעוד שב קודם הסכום זהה.

נחשב כעת את χ_{pair} בקירוב RPA בגלל האינטראקציה המתווכת על ידי פונונים:

$\chi_{pair} = \sum_{k,\omega}$ 

שימו לב כי בניגוד ל χ_{pp} שבקירוב RPA מורכבת מסכימה של bubble diagrams הרי ש χ_{pair} עבור בקירוב ה RPA בסכום של ladder diagrams.

ו- שכן טופולוגית בנוי

קל לראות כי באלמנט החוזר על עצמו הוא: $-\frac{1}{\beta V}\sum_{k'\omega'} |\bar{g}_{k-k'}|^2 D_0(k-k', i\omega - i\omega')\, G_0(k', i\omega')\, G_0(-k', i\omega')$

לכן:

$$\chi_{pair} = \frac{1}{\beta V}\sum_{k, \omega_n} G_0(k, i\omega_n)\, G_0(-k, -i\omega_n)$$

$$\times \left\{ 1 + \frac{1}{\beta V}\sum_{k' \omega_n'} |\bar{g}_{k-k'}|^2 D_0(k-k', i\omega_n - i\omega_n')\, G_0(k', i\omega_n')\, G_0(-k', -i\omega_n') \right\}^{-1}$$

χ_{pair} מתבדרת ולכן מתבדרת על אי היציבות כלפי pairing כאשר המכנה מתאפס. נוכל לחשב המכנה אם נניח תלות את הבעיה כאשר נחליף את האינטראקציה בגודל מתאים מהצורה $|\bar{g}_{k-k'}|^2 D_0(k-k', i\omega - i\omega')$ הפונונים:

$$\begin{cases} -V_0 & |\omega_n|, |\omega_n'| < \omega_0 \\ 0 & \text{אחרת} \end{cases}$$ באינטראקציה מקורבת

מכיון ש- $\bar{g}_{k-k'} \sim |k-k'|^2$ התרומות המשמעותיות לאינטראקציה האפקטיבית באות מ $k-k'$ גדול - ולמעשה ממוצעות על k
אורכי גל קצרים, כאשר הפונונים משתתפים, וניתן להחליף בקירוב ב ω_D? מכיון שהתרומה מ D_0 מתאפסת אם $\omega-\omega' \gg \omega_0$ משמשת ω_0 כ cutoff לאינטגרל על ω'.
(מדוע התדירויות נשארות עם $\omega_0 \ll |\omega| \sim |\omega'|$ אין תרומה?)

כעת המשוואה ל T_c: הטמפרטורה הקריטית בה מתרחשת אי היציבות היא:

$$1 = T_c V_0 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} {\sum_{\omega_n}}' \mathcal{G}_0(k, i\omega_n)\, \mathcal{G}_0(-k, -i\omega_n)$$

$$= T_c V_0 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} {\sum_{\omega_n}}' \frac{1}{\omega_n^2 + \xi_k^2}$$

נעבור מאינטגרל על k לאינטגרל על ξ עם צפיפות המצבים $g(\xi)$

$$= T_c V_0 {\sum_{\omega_n}}' \int d\xi\, g(\xi) \frac{1}{\omega_n^2 + \xi^2}$$

$$\simeq \pi V_0 g_0 T_c {\sum_{\omega_n}}' \frac{1}{|\omega_n|} \qquad g_0 = g(\epsilon_F)$$

$$= V_0 g_0 \sum_{n=0}^{\frac{\omega_0}{2\pi T_c}} \frac{1}{n+\frac{1}{2}} \qquad \omega_n = 2\pi T_c \cdot \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\overset{\frac{\omega_0}{T_c} \to \infty}{=} V_0 g_0 \left[\gamma + \ln \frac{2\omega_0}{\pi T_c} \right] \qquad \gamma: \text{Euler's constant} = 0.5772..$$

$$T_c = \frac{2}{\pi} e^{\gamma} \omega_0 e^{-\frac{1}{V_0 g_0}} \simeq 1.13\, \omega_0 e^{-\frac{1}{V_0 g_0}} \qquad \Leftarrow$$

זוהי התוצאה המפורסמת של BCS - שימו לב להבדל במעריך יחסית לתוצאה של Cooper.
שימו גם לב לכך שהתוצאה איננה אנליטית ב V_0.

תורת לנדאו-מיגדל נאותה לביאות רק שימוש באינטראקציה המוחזרת דרך פונונים, כפי שקיבלנו בעזרת שימוש בקרוב ה RPA, אך בעזרת הקרוב הנ"ל יותר כן השתמשנו בחישוב האחרון.
למעשה מרבית השאלות המעניינות ניתנות למענה במסגרת מודל פשוט יותר כפי שנעשה על ידי BCS. הנקודה המהותית הינה המצאותה של אינטראקציה מושכת בין האלקטרונים בקליפה ליד E_F, אפקטים של retardation הינם משניים.
BCS החלו את הניתוח שלהם מההמילטוניאן האפקטיבי הבא המתאר אלקטרונים העוברים אינטראקציה כבעלת מושכת בסגנון זו של Cooper:

$$H = H_0 + \sum_{\substack{kk'q \\ \sigma\sigma'}}' V_{kk'q}\, C^+_{k\sigma} C^+_{-k+q\sigma'} C_{-k'+q\sigma'} C_{k'\sigma}$$

כאשר ה prime על הסכום מזכיר לנו כי האנרגיה של המצבים המשתתפים באינטראקציה חייבת להיות במרחק ω_D, לכל היותר, מ E_F. שימו לב כי אפשר אינטראקציה זה משקל מאינטראקציה לוקלית מהצורה $\psi^+(r)\psi^+(r)\psi(r)\psi(r)$.
BCS הניחו מעבר לכך ש pairing מתקיים רק עבור zero center of mass mom.
$\Leftarrow$ $q=0$ וגם singlet channel $\Leftarrow$ $\sigma=-\sigma'$ וקיבלו את pairing Hamiltonian הבא:

$$H = \sum_{k\sigma} \xi_k C^+_{k\sigma} C_{k\sigma} + \sum_{kk'} V_{kk'}\, C^+_{k\uparrow} C^+_{-k\downarrow} C_{-k'\downarrow} C_{k'\uparrow}$$

במאמר המקורי שלהם BCS ניחשו מצב יסוד להמילטוניאן זה המתאר אכלוס של זוג מצבים $k\uparrow$ ו $-k\downarrow$ באמפליטודה v_k ואי-אכלוס של הזוג באמפליטודה u_k כך ש $|u_k|^2+|v_k|^2=1$:

$$|\psi\rangle = \prod_k \left(u_k + v_k C^+_{k\uparrow} C^+_{-k\downarrow}\right)|0\rangle$$

vacuum

זו פונקצית גל וריאציונית והאמפליטודות u_k ו v_k נקבעות כך שהמצב המוצע הנ"ל מביא למינימום את האנרגיה: $\langle\psi|H|\psi\rangle$.

שימו לב כי $|\psi\rangle$ אינו מצב עצמי של $\hat N$: מספר החלקיקים. פונקצית הגל הנו מתארת סופרפוזיציה של מצבים עם $0,2,4,\dots$ חלקיקים.
במסגרת קוונטית עם מספר קבוע של חלקיקים (כמו במקרה של מוליך מבודד) ההמילטוניאן אינווריאנטי

תחת $c^{+}_{k\sigma} \to e^{i\theta} c^{+}_{k\sigma}$. רק אם H שמשמש אינווריאנטי תחת סימטריית $U(1)$ גלובלית זו. בניגוד ל-H, $|\psi\rangle$ המאופיין על ידי המקדמים $\{u_k, v_k\}$ אינה אינווריאנטית תחת טרנספורמציה זו שכן $|\psi\rangle \to |\psi(\phi)\rangle$ עם $\{u_k, e^{i\phi} v_k\}$ $\phi = 2\theta$.
המצב של BCS שובר לכן באופן ספונטני את סימטריית $U(1)$ של ההמילטוניאן שכן המצב "בוחר" ϕ מסוימת $0 < \phi < 2\pi$. הערך המוחלט של פאזה זו אינו ניתן למדידה אך שינויים בה: $\delta\phi(r,t)$ מובילים לתופעות מעניינות: המוליכות העל-מוליכה. למצב phase-rigidity.

מתוך $|\psi\rangle$ ניתן להרכיב מצב בעל מספר חלקיקים נתון על ידי יצירת סופרפוזיציה קוהרנטית של מצבים עם פאזה מוגדרת:

$$|\psi(N)\rangle = \int_0^{2\pi} d\phi\, e^{-i\phi\frac{N}{2}} |\psi(\phi)\rangle$$

(האינטגרציה על ϕ נותנת אפס אלא אם הפאזה של כל זוג יש בדיוק $\frac{N}{2}$ זוגות אלקטרונים יוצרים כל אחד בו עם פקטור $e^{i\phi}$). למצב זה חסר מידע מקומי של הפאזה אך phase-rigidity עדיין קיימת. ניתן להראות כי הפאזה ומספר החלקיקים גדלים קנוניים $[\frac{N}{2}, \phi] = i$

כפי שהראנו בתרגול

$$\langle N\rangle = \langle\psi| \sum_{k\sigma} n_{k\sigma} |\psi\rangle = 2\sum_k |v_k|^2$$

$$\langle\psi|(N - \langle N\rangle)^2|\psi\rangle = 4\sum_k u_k^2 v_k^2$$!

כפי שהראנו v_k קטן מ-1 ל-0 בתחום אנרגיה של $k_B T_c$ מסביב ל-E_F ובאותו התחום ממש u_k גדל מ-0 ל-1, לכן ש

$$\langle\psi|(N - \langle N\rangle)^2|\psi\rangle \sim T_c \cdot \frac{\langle N\rangle}{T_F}$$

הערכה לצפיפות המצבים

ולכן

$$\frac{\sqrt{\langle (N - \langle N\rangle)^2\rangle}}{\langle N\rangle} \sim \left(\frac{T_c}{T_F}\right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{\langle N\rangle}} \sim \frac{10^{-2}}{\sqrt{\langle N\rangle}}$$

עבור על מוליכים טיפוסיים.

במקום להמשיך בבחינת פונקצית הגל הוריאציונית של BCS אני מעוניין להציג לכם טיפול שונה בבעיה כפי שנעשה על ידי Bogoliubov.

ראינו כי אי היציבות של הבעיה בגלל ה pairing מתבטאת בכך ש $\langle C^{+}_{k\uparrow} C^{+}_{-k\downarrow}\rangle$ יכול להיות שונה מאפס גם עבור שדה pairing חיצוני אינפיניטסימלי. ננסה לכן לנסח קירוב mean-field מתאים, בדומה למה שנעשה בקירוב HF, שבו נבחנה אפשרות זו. נרשום

$$C^{+}_{k\uparrow} C^{+}_{-k\downarrow} C_{-k'\downarrow} C_{k'\uparrow} = \left[\langle C^{+}_{k\uparrow} C^{+}_{-k\downarrow}\rangle + \delta(c^{+}c^{+})\right]\left[\langle C_{-k'\downarrow} C_{k'\uparrow}\rangle + \delta(cc)\right]$$

כאשר

$$\delta(\overset{++}{cc}) = C^{+}_{k\uparrow} C^{+}_{-k\downarrow} - \langle C^{+}_{k\uparrow} C^{+}_{-k\downarrow}\rangle$$

ובדומה, $\delta(cc)$, הינן הפלוקטואציות של אופרטורים אלה ביחס לערכי התצפית שלהם. אם תאור ה mean-field מוצדק, אזי הן אמורות להיות קטנות על ידי השוואה לשיעור, ניתן להזניח איברים מסדר δ^2. במסגרת קירוב mean-field כזה ההמילטוניאן הינו

$$H = \sum_{k,\sigma} \xi_k C^{+}_{k\sigma} C_{k\sigma} - \sum_k \Delta_k C^{+}_{k\uparrow} C^{+}_{-k\downarrow} - \sum_k \Delta^{*}_k C_{-k\downarrow} C_{k\uparrow} + \sum_k \Delta_k \langle C^{+}_{k\uparrow} C^{+}_{-k\downarrow}\rangle$$

כאשר

$$(*) \quad \Delta_k = -\sum_{k'} V_{kk'} \langle C_{-k'\downarrow} C_{k'\uparrow}\rangle$$

קיבלנו לכן המילטוניאן אפקטיבי עם חלקים התלויים בפרמטר הסדר Δ (order parameter). עלינו לפתור את המצבים העצמיים והאנרגיות העצמיות של H אך שמירה על self consistency בכך ש Δ מחושב בעזרת $(*)$ דרך ממוצעים ביחס ל H (התלוי ב Δ בעצמו) (כמו ב self-consistent HF).

נלכסן כעת את ההמילטוניאן בעזרת טרנספורמציה קנונית שהמציא Bogoliubov. נגדיר את אופרטורי היצירה והחיסול ל quasi-particles γ_{k0}, γ_{k1}

$$C_{k\uparrow} = u^{*}_k \gamma_{k0} + v_k \gamma^{+}_{k1} \qquad \gamma_{k0} = u_k C_{k\uparrow} - v_k C^{+}_{-k\downarrow}$$

$$\Rightarrow$$

$$C^{+}_{-k\downarrow} = -v^{*}_k \gamma_{k0} + u_k \gamma^{+}_{k1} \qquad \gamma_{k1} = u_k C_{-k\downarrow} + v_k C^{+}_{k\uparrow}$$

שימו לב כי γ_{k0} משמיד בהרסה אלקטרון עם $k\uparrow$ ויוצר אלקטרון עם $-k\downarrow$.
במצב היסוד האלקטרונים מזווגים בזוגות Cooper. האופרטור γ יוצר אלקטרון או חור
חסרי בני זוג.

אנו מדרישים כי הטרנספורמציה תהיה קנונית: שהאופרטורים החדשים יקיימו את אותם יחסי אנטי-קומוטציה כמו האופרטורים האלקטרונים המקוריים. קל לראות כי התנאי מתקיים אם

$$\{\gamma_{k0},\gamma_{k0}^{+}\} = \{\gamma_{k1},\gamma_{k1}\} = |u_k|^2+|v_k|^2 = 1 \qquad (*)$$

אחרי עוד המון מעברים באותו עניין.
ע"י הצבת הטרנספורמציה לתוך ההמילטוניאן נקבל

$$H = \sum_k \left[\xi_k\left(|u_k|^2-|v_k|^2\right) + \Delta_k u_k v_k^* + \Delta_k^* u_k^* v_k\right]\left(\gamma_{k0}^{+}\gamma_{k0}+\gamma_{k1}^{+}\gamma_{k1}\right)$$

$$+ \sum_k \left[\left(2\xi_k u_k v_k + \Delta_k^* v_k^2 - \Delta_k u_k^2\right)\gamma_{k0}\gamma_{k1} + h.c\right]$$

$$+ \sum_k 2\xi_k|v_k|^2 - \Delta_k u_k v_k^* - \Delta_k^* u_k^* v_k + \Delta_k\langle C_{k\uparrow}^{+}C_{-k\downarrow}^{+}\rangle$$

הסכום האחרון הוא קבוע משוה בקירוב אופטימלי. אם נבחר את u_k ו-v_k כך שהמקדמים של האיברים הפרנדיאגונליים $\gamma\gamma$ ו-$\gamma^{+}\gamma^{+}$ יתאפסו נישאר עם המילטוניאן מלוכסן. מצב כזה מתקיים בתנאי ש

$$2\xi_k u_k v_k + \Delta_k^* v_k^2 - \Delta_k u_k^2 = 0$$

הפתרון בתרגיל:

נבחר תחת האילוץ $(*)$

$$u_k = \sin\theta\, e^{i\alpha} \qquad \Delta_k = \Delta e^{i\phi} \qquad \Delta>0,\quad \frac{\pi}{2}>\theta>0$$

$$v_k = \cos\theta\, e^{i\beta}$$

$$2\xi \sin\theta\cos\theta\, e^{i(\alpha+\beta)} + \Delta\cos^2\theta\, e^{i(2\beta-\phi)} - \Delta\sin^2\theta\, e^{i(2\alpha+\phi)} = 0 \qquad \Leftarrow$$

$$\sin 2\theta + \frac{\Delta}{2\xi}e^{-i(\phi+\alpha-\beta)}(1+\cos 2\theta) - \frac{\Delta}{2\xi}e^{i(\phi+\alpha-\beta)}(1-\cos 2\theta) = 0 \qquad \Leftarrow$$

$$\sin 2\theta + \frac{\Delta}{\xi}\cos(\phi+\alpha-\beta)\cos 2\theta = i\frac{\Delta}{\xi}\sin(\phi+\alpha-\beta) \Leftarrow$$

כדי שהמשוואה תתקיים אז נדרוש $\phi+\alpha-\beta=0$ $\Leftarrow$ ϕ שווה לפאזה היחסית בין v_k ל-u_k

בלי הגבלת הכלליות נבחר $\alpha=0$ $\Leftarrow$ $\beta=\phi$

$$\sin^2 2\theta\left[1+\left(\frac{\Delta}{\xi}\right)^2\right] = \left(\frac{\Delta}{\xi}\right)^2 \Leftarrow$$

$$\sin 2\theta_k = \frac{|\Delta_k|}{E_k}, \quad \cos 2\theta_k = -\frac{\xi_k}{E_k}$$

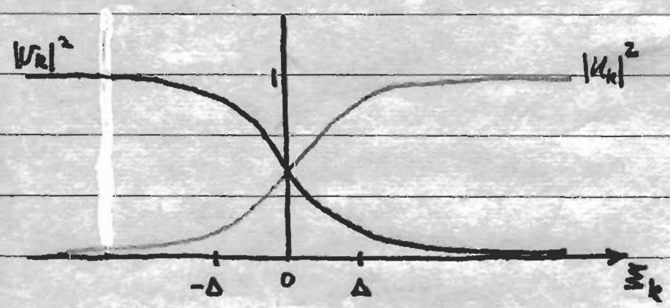
$$|u_k|^2 = \frac{1}{2}\left(1+\frac{\xi_k}{E_k}\right) \Leftarrow$$

$$|v_k|^2 = \frac{1}{2}\left(1-\frac{\xi_k}{E_k}\right)$$

כאשר ה Bogoliubov quasiparticle energy היא $E_k = \sqrt{\xi_k^2+|\Delta_k|^2}$

התכונה של הפתרון כך ש $|v_k|^2\to 1$ מתחת ל E_F ו $|v_k|^2\to 0$ מעל E_F

כדי לקבל את האנרגיה המתאימה א $\sum_k 2\xi_k|v_k|^2$ לאנרגיה של הבסיס.



אני משתמש לכך בעובדה ש

$$\langle c^\dagger_{k\uparrow}c_{k\uparrow} + c^\dagger_{-k\downarrow}c_{-k\downarrow}\rangle \underset{T=0\text{ ב}}{=} 2|v_k|^2$$

$$H = \sum_k\left(\xi_k - E_k + \Delta_k\langle c^\dagger_{k\uparrow}c^\dagger_{-k\downarrow}\rangle\right) + \sum_k E_k\left(\gamma^\dagger_{k0}\gamma_{k0}+\gamma^\dagger_{k1}\gamma_{k1}\right)$$

האיבר הראשון הינו אנרגיה של הבסיס. בגבול $\Delta\to 0$ הוא הולך ל $\sum_{k<k_F}\xi_k-|\xi_k| = 2\sum_{k<k_F}\xi_k$ כצפוי.

ההפרש בין אנרגיה של הבסיס של המערכת המוליכה $2\sum_{k_F}\xi_k$ הוא אנרגיה "ההתעבות" condensation energy זאת האנרגיה שהמערכת מרוויחה במעבר למצב על-מוליך. אני משאיר לכם להראות

תרגיל: ש המערכת אכן מרוויחה את האנרגיה הזו בטמפ' $T=0$ ב $\approx -\frac{1}{2}g_0\Delta^2$

בצפיפות מצבים ב E_F.