

§ Teorema de Wick

Def. Producto normal

Para un producto arbitrario de operadores de creación y destrucción, el Producto Normal se define como un producto re-ordenado, con todos los operadores de creación a la izquierda de los operadores de destrucción. Para operadores fermiónicos, multiplicamos por (-1) por cada intercambio de pares.

Ejemplos:

a) Bosones

$$N(a_\alpha a_\alpha^\dagger) \equiv a_\alpha^\dagger a_\alpha \equiv : a_\alpha a_\alpha^\dagger :$$

$$N(a_\alpha a_\beta^\dagger a_\gamma) = a_\beta^\dagger a_\alpha a_\gamma$$

b) Fermiones

$$N(c_\alpha c_\alpha^\dagger) = -c_\alpha^\dagger c_\alpha = : c_\alpha c_\alpha^\dagger :$$

$$\begin{aligned} N(c_\alpha c_\beta c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\gamma) &= c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\alpha c_\beta c_\gamma \\ &= -c_\beta^\dagger c_\alpha^\dagger c_\alpha c_\beta c_\gamma \end{aligned}$$

Def. Contracción de un par de operadores

Es definida como el valor esperado del producto de operadores, para el vacío de la representación

$$\langle AB \rangle_0 \equiv \langle 0 | AB | 0 \rangle$$

Las únicas contracciones diferentes de cero corresponden a productos en orden antinormal:

$$\langle c_\alpha c_\alpha^\dagger \rangle_0 = \langle 0 | c_\alpha c_\alpha^\dagger | 0 \rangle \neq 0$$

$$\langle a_\alpha a_\beta^\dagger \rangle_0 = \langle 0 | a_\alpha a_\beta^\dagger | 0 \rangle = \delta_{\alpha\beta} \langle a_\alpha a_\alpha^\dagger \rangle_0$$

Teorema de Wick: (sin demostración)

Un producto ordinario de cualquier número finito de operadores de creación y destrucción es igual a la suma de los productos normales, de los cuales hemos retirado 0, 1, 2, ..., contracciones de todas las maneras posibles

$$AB = N(AB) + \langle AB \rangle_0$$

Ejemplos:

a) $cc^\dagger = -c^\dagger c + [c, c^\dagger]_+ \quad (\text{fermiones})$

$$aa^\dagger = a^\dagger a + [a, a^\dagger]_- \quad (\text{bosones})$$

Pero $[c, c^\dagger]_+ = 1 = \langle 0 | [c, c^\dagger]_+ | 0 \rangle = \langle 0 | (cc^\dagger + c^\dagger c) | 0 \rangle$
 $= \langle 0 | cc^\dagger | 0 \rangle = \langle cc^\dagger \rangle_0$

b) Para varios (más que dos) operadores fermiónicos:

$$\begin{aligned} ABCD = & N(ABCD) + N(AB)\langle CD \rangle_0 - N(AC)\langle BD \rangle_0 + \\ & + N(BC)\langle AD \rangle_0 + N(AD)\langle BC \rangle_0 - N(BD)\langle AC \rangle_0 \\ & + N(CD)\langle AB \rangle_0 + \langle AB \rangle_0 \langle CD \rangle_0 - \langle AC \rangle_0 \langle BD \rangle_0 + \langle AD \rangle_0 \langle BC \rangle_0 \end{aligned}$$

El signo es el signo de la permutación necesaria para remover los operadores que entran en la contracción

§ Sistemas de muchos fermiones

Consideremos un número arbitrario de fermiones (electrones) independientes. Suponemos que los electrones están sujetos a un potencial externo $V(\vec{x})$. En el caso de materia condensada, este potencial puede representar el potencial cristalino y este problema conduce a estados de una partícula llamados orbitales. Estos orbitales pueden estar localizados en torno de sitios de la red cristalina (orbitales de Wannier), o pueden representar estados extendidos que reflejan la simetría de traslación del potencial cristalino (estados de Bloch).

Llamamos $\{\phi_j(\vec{x})\}_j$ al conjunto de estos orbitales y usamos esta representación para los operadores de creación y destrucción

$$c_\alpha^\dagger |0\rangle = |\phi_\alpha\rangle$$

$\{\alpha\}$ representa un conjunto de números cuánticos. Por ejemplo:

$$\alpha = (\vec{k}, \sigma), \quad \sigma = \pm 1,$$

donde escribimos explícitamente el índice de spin σ .

El estado fundamental de un sistema de N electrones independientes es llamado de Mar de Fermi. Para este estado, tenemos ocupados todos los estados de una partícula con energías más bajas:

$$|F\rangle = \prod_{\alpha \leq N} c_\alpha^\dagger |0\rangle.$$

$\alpha \leq N$ significa simbólicamente eso: ocupamos los N niveles más bajos de energía.

Representación de partícula - hueco:

Es una representación conveniente donde el Mar de Fermi opera como el vacío. Definimos nuevos operadores de creación y destrucción:

Def. $\rightarrow b_\alpha \equiv c_\alpha^\dagger$, $b_\alpha^\dagger \equiv c_\alpha$, si α está ocupado en $|F\rangle$ (operador de hueco)

$\rightarrow b_\alpha \equiv c_\alpha$, $b_\alpha^\dagger \equiv c_\alpha^\dagger$, si α está desocupado en $|F\rangle$ (operador de partícula)

Tenemos la propiedad:

$$b_\alpha |F\rangle = 0, \text{ todo } \alpha.$$

Podemos aplicar el Teorema de Wick con las siguientes reglas:

i) Tomamos el orden normal en relación a los operadores partícula - hueco, con b_α^\dagger a la izquierda de b_α ;

ii) Las contracciones son definidas como valores esperados en relación al mar de Fermi

$$\langle AB \rangle_F \equiv \langle F | AB | F \rangle$$

Las únicas contracciones no nulas son $\langle b_\alpha b_\alpha^\dagger \rangle_F$. Esto significa que

$$\langle c_\alpha^\dagger c_\alpha \rangle_F = 1, \quad \alpha \leq N \text{ (huecos)}$$

$$\langle c_\alpha c_\alpha^\dagger \rangle_F = 1, \quad \alpha > N \text{ (partículas)}$$

El Hamiltoniano de electrones independientes se escribe como:

$$H = \sum_{(\text{todo } \alpha)} \epsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}$$

$$= \sum_{\alpha \leq N} \epsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} + \sum_{\alpha > N} \epsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha},$$

y en términos de los operadores de partícula / hueco:

$$H = \sum_{\alpha > N} \epsilon_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha} + \sum_{\alpha \leq N} \epsilon_{\alpha} b_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger}.$$

Usando la relación de anticonmutación:

$$b_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} = -b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha} + 1,$$

$$H = \sum_{\alpha > N} \epsilon_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha} - \sum_{\alpha \leq N} \epsilon_{\alpha} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha} + \sum_{\alpha \leq N} \epsilon_{\alpha}$$

es La energía del mar de Fermi (estado fundamental)

$$E_0 = \sum_{\alpha \leq N} \epsilon_{\alpha}.$$

Vemos que tenemos una generalización del caso relativista, con la representación de partícula / antipartícula. Pero en este caso, la energía del estado fundamental es finita. La analogía es completa si referimos la energía al nivel de Fermi ϵ_F . Así

$$\epsilon_{\alpha} > 0 \text{ para } \alpha > N \text{ y } \epsilon_{\alpha} \leq 0 \text{ para } \alpha \leq N$$

§ Método de Hartree - Fock

Incluimos las interacciones, pero tratamos de escribir la función de onda a la manera de un sistema libre, como

$$|\Psi\rangle = c_1^+ c_2^+ \dots c_N^+ |0\rangle = \prod_{\alpha \leq N} c_\alpha^+ |0\rangle.$$

Determinamos de manera variacional, el conjunto de estados de una partícula $\{|\phi_\alpha\rangle\}_\alpha$, al cual se refieren los operadores (c_α, c_α^+) . Esto conduce a las llamadas ecuaciones autoconsistentes de Hartree - Fock, donde el potencial de interacción electrón - electrón es tomado en cuenta a través de un potencial autoconsistente de 1-partícula (potencial de Hartree - Fock). Para el teorema de Wick, reemplazamos el estado $|F\rangle$ por el estado $|\Psi\rangle$.

§ Teoría del apareamiento BCS

BCS: J. Bardeen, L. N. Cooper y J. R. Schrieffer.

Véase, por ejemplo, J. R. Schrieffer,

"Theory of Superconductivity" (Benjamin, 1983)

BCS: Phys. Rev. 108, 1175 (1957)

Una pequeña interacción atractiva entre fermiones, puede producir una condensación para un estado de pares correlacionados (estado superconductor), cuya energía es más baja que la del estado fundamental normal de un sistema de fermiones. Esta condensación crea un gap que separa el estado $|BCS\rangle$ de sus estados excitados de más baja energía. Mostraremos que existe una analogía formal entre este problema y una teoría de campo relativista con masa

§ Estado fundamental BCS

Es postulada la forma:

$$|BCS\rangle = \prod_{\alpha > 0} (u_{\alpha} + v_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{-\alpha}^{\dagger}) |0\rangle, \quad (1)$$

donde el índice α denota los números cuánticos (\vec{k}, σ) , del momentum y spin. En esta convención

$$-\alpha = (-\vec{k}, -\sigma).$$

La forma (1) representa un estado variacional en relación a los parámetros (u_{α}, v_{α}) . Estos son considerados reales.

Normalización:

$$\langle BCS | BCS \rangle = \prod_{\alpha > 0} (u_{\alpha}^2 + v_{\alpha}^2)$$

Exigimos que

$$u_\alpha^2 + v_\alpha^2 = 1. \quad (2)$$

- i) los valores de los coeficientes (u_α, v_α) son determinados variacionalmente;
- ii) El estado $|HF\rangle$ (Hartree-Fock) es un límite de la teoría, con

$$u_\alpha = 0, v_\alpha = 1, \text{ para } k_\alpha \leq k_F,$$

$$u_\alpha = 1, v_\alpha = 0, \text{ para } k_\alpha > k_F.$$

Vemos que $|HF\rangle$ es un caso trivial de $|BCS\rangle$. El objetivo de la teoría es encontrar un estado $|BCS\rangle$ no trivial con energía más baja que $|HF\rangle$.

Pasar de $|HF\rangle$ para $|BCS\rangle$ puede ser pensado como el efecto de una transformación canónica, donde cambiamos el estado vacío de la teoría. Esto es realizado, efectuando una transformación de Bogoliubov de los operadores originales de creación y destrucción.

Vemos que en el estado BCS pareamos electrones con estados $\alpha = (\vec{k}, \uparrow)$ y $-\alpha = (-\vec{k}, \downarrow)$. Proponemos transformación lineal

$$\left. \begin{aligned} B_\alpha &\equiv u_\alpha C_\alpha - v_\alpha C_{-\alpha}^+ \\ B_{-\alpha} &\equiv u_\alpha C_{-\alpha} + v_\alpha C_\alpha^+ \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Ver más adelante} \\ \text{la relación} \\ \text{para el Hamiltoniano BCS} \end{array}$$

con (u_α, v_α) reales y

$$v_{-\alpha} = -v_\alpha,$$

$$u_{-\alpha} = u_\alpha.$$

y las transformaciones complementarias:

$$B_{\alpha}^{\dagger} = u_{\alpha} C_{\alpha}^{\dagger} - v_{\alpha} C_{-\alpha},$$

$$B_{-\alpha}^{\dagger} = u_{\alpha} C_{-\alpha}^{\dagger} + v_{\alpha} C_{\alpha}.$$

La transformación es canónica (veamos):

$$\begin{aligned} \text{i) } \{B_{\alpha}, B_{\beta}^{\dagger}\} &= \{u_{\alpha} C_{\alpha} - v_{\alpha} C_{-\alpha}, u_{\beta} C_{\beta}^{\dagger} - v_{\beta} C_{-\beta}^{\dagger}\} \\ &= u_{\alpha} u_{\beta} \underbrace{\{C_{\alpha}, C_{\beta}^{\dagger}\}}_{\delta_{\alpha\beta}} + v_{\alpha} v_{\beta} \underbrace{\{C_{-\alpha}, C_{-\beta}^{\dagger}\}}_{\delta_{\alpha\beta}} \end{aligned}$$

$$= (u_{\alpha}^2 + v_{\alpha}^2) \delta_{\alpha\beta} \Rightarrow u_{\alpha}^2 + v_{\alpha}^2 = 1,$$

$$\begin{aligned} \text{ii) } \{B_{\alpha}, B_{\beta}\} &= \{u_{\alpha} C_{\alpha} - v_{\alpha} C_{-\alpha}, u_{\beta} C_{\beta} - v_{\beta} C_{-\beta}^{\dagger}\} \\ &= -u_{\alpha} v_{\beta} \underbrace{\{C_{\alpha}, C_{\beta}^{\dagger}\}}_{\delta_{\alpha,-\beta}} - u_{\beta} v_{\alpha} \underbrace{\{C_{-\alpha}, C_{\beta}\}}_{\delta_{\alpha,-\beta}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= -(u_{\alpha} v_{\beta} + u_{\beta} v_{\alpha}) \delta_{\alpha-\beta} = -(-u_{\alpha} v_{\alpha} + u_{\alpha} v_{\alpha}) \delta_{\alpha-\beta} \\ &= 0. \end{aligned}$$

Escribimos las relaciones que cierran el álgebra:

$$\begin{cases} B_{\alpha} = u_{\alpha} C_{\alpha} - v_{\alpha} C_{-\alpha}^{\dagger}, \\ B_{-\alpha}^{\dagger} = v_{\alpha} C_{\alpha} + u_{\alpha} C_{-\alpha}^{\dagger}, \end{cases}$$

y pasando para la forma matricial:

$$\begin{pmatrix} B_\alpha \\ B_{-\alpha}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_\alpha & -v_\alpha \\ v_\alpha & u_\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_\alpha \\ C_{-\alpha}^\dagger \end{pmatrix}$$

La transformación representa una rotación, con
 $u_\alpha^2 + v_\alpha^2 = 1$.

La transformación inversa es dada por:

$$\begin{pmatrix} C_\alpha \\ C_{-\alpha}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_\alpha & v_\alpha \\ -v_\alpha & u_\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_\alpha \\ B_{-\alpha}^\dagger \end{pmatrix},$$

es decir:

$$C_\alpha = u_\alpha B_\alpha + v_\alpha B_{-\alpha}^\dagger,$$

$$C_\alpha^\dagger = u_\alpha B_\alpha^\dagger + v_\alpha B_{-\alpha},$$

$$C_{-\alpha}^\dagger = u_\alpha B_{-\alpha}^\dagger - v_\alpha B_\alpha,$$

$$C_{-\alpha} = u_\alpha B_{-\alpha} - v_\alpha B_\alpha^\dagger.$$

Es interesante notar que el estado $|BCS\rangle$ puede ser escrito como un estado de Hartree-Fock generalizado, en términos de los operadores $\{B_\alpha\}$. En efecto,

$$\begin{aligned} B_\alpha B_{-\alpha} |0\rangle &= (u_\alpha C_\alpha - v_\alpha C_{-\alpha}^\dagger)(u_\alpha C_{-\alpha} + v_\alpha C_\alpha^\dagger) |0\rangle \\ &= (u_\alpha^2 C_\alpha C_{-\alpha} + u_\alpha v_\alpha (C_\alpha C_\alpha^\dagger - C_{-\alpha}^\dagger C_{-\alpha}) - v_\alpha^2 C_{-\alpha}^\dagger C_\alpha^\dagger) |0\rangle \\ &= [u_\alpha v_\alpha (-C_\alpha^\dagger C_\alpha + 1) + v_\alpha^2 C_\alpha^\dagger C_{-\alpha}^\dagger] |0\rangle \end{aligned}$$

$$= v_{\alpha} (u_{\alpha} + v_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{-\alpha}^{\dagger}) |0\rangle,$$

así

$$\begin{aligned} \prod_{\alpha > 0} B_{\alpha} B_{-\alpha} |0\rangle &= \prod_{\alpha > 0} v_{\alpha} (u_{\alpha} + v_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{-\alpha}^{\dagger}) |0\rangle \\ &= \left(\prod_{\alpha > 0} v_{\alpha} \right) |BCS\rangle \end{aligned}$$

De esta forma, es directo que el estado $|BCS\rangle$ es el vacío de los operadores B_{α} , pues para operadores fermiónicos

$$B_{\alpha}^2 = 0.$$

Tenemos entonces:

$$B_{\alpha} |BCS\rangle = 0, \quad \forall \alpha. \quad (*)$$

Podemos aplicar ahora el Teorema de Wick para los operadores fermiónicos B_{α} , usando $|BCS\rangle$ como vacío. Notamos que:

i) el orden normal es tomado en relación a los operadores de Bogoliubov, colocando B_{α}^{\dagger} a la izquierda de B_{α} ;

ii) la contracción de dos operadores (A, B) se define como el valor esperado en relación al estado $|BCS\rangle$

$$\langle AB \rangle_{BCS} \equiv \langle BCS | AB | BCS \rangle$$

La única contracción no nula para las cuasi-partículas es $\langle B_\alpha B_\alpha^\dagger \rangle_{BCS} = 1$.

Calculamos ahora contracciones de los operadores fermiónicos originales ($C_\alpha, C_\alpha^\dagger$):

$$\langle C_\alpha C_\beta \rangle_{BCS} = \langle (u_\alpha B_\alpha + v_\alpha B_{-\alpha}^\dagger)(u_\beta B_\beta + v_\beta B_{-\beta}^\dagger) \rangle_{BCS}$$

$$= u_\alpha v_\beta \langle B_\alpha B_{-\beta}^\dagger \rangle_{BCS} = u_\alpha v_\beta \delta_{\alpha-\beta}$$

$$= -u_\alpha v_\alpha \delta_{\alpha-\beta}, \quad \begin{matrix} \nearrow \\ \searrow \end{matrix} \text{ (médias 'anômalas')}$$

$$\langle C_\alpha^\dagger C_\beta^\dagger \rangle_{BCS} = \langle (u_\alpha B_\alpha^\dagger + v_\alpha B_{-\alpha})(u_\beta B_\beta^\dagger + v_\beta B_{-\beta}) \rangle_{BCS}$$

$$= v_\alpha u_\beta \langle B_{-\alpha} B_\beta^\dagger \rangle_{BCS} = \delta_{\alpha-\beta} u_\alpha v_\alpha,$$

$$\langle C_\alpha C_\beta^\dagger \rangle_{BCS} = u_\alpha u_\beta \langle B_\alpha B_\beta^\dagger \rangle_{BCS} = u_\alpha^2 \delta_{\alpha\beta},$$

$$\langle C_\alpha^\dagger C_\beta \rangle_{BCS} = v_\alpha v_\beta \langle B_{-\alpha} B_{-\beta}^\dagger \rangle_{BCS} = v_\alpha^2 \delta_{\alpha\beta}.$$

Resultado: el promedio del número de electrones para el estado $\alpha = (\vec{k}, \sigma)$, en el estado BCS es dado por:

$$n_\alpha = \langle C_\alpha^\dagger C_\alpha \rangle_{BCS} = u_\alpha^2,$$

lo que permite interpretar físicamente los parámetros

(u_α, v_α) del estado BCS.

La Teoría BCS supone que el estado fundamental de un superconductor puede ser descrito por un Hamiltoniano efectivo donde apenas tomamos en cuenta las interacciones entre los pares:

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha > 0} \epsilon_\alpha (c_\alpha^\dagger c_\alpha + c_{-\alpha}^\dagger c_{-\alpha}) + \sum_{\substack{\alpha, \alpha' > 0 \\ \alpha \neq \alpha'}} V_{\alpha\alpha'} c_\alpha^\dagger c_{-\alpha}^\dagger c_{-\alpha} c_\alpha. \quad (1)$$

A pesar de usar este Hamiltoniano simplificado, no sabemos resolver ese problema en forma cerrada. Usemos el método de la ecuación de movimiento.

Sin pérdida de generalidad, supongamos que $\beta > 0$:

$$[\mathcal{H}, c_\beta] = -\epsilon_\beta c_\beta + \sum_{\substack{\alpha, \alpha' > 0 \\ \alpha \neq \alpha'}} V_{\alpha\alpha'} [c_\alpha^\dagger c_{-\alpha}^\dagger c_{-\alpha} c_\alpha, c_\beta]$$

Para el conmutador, tenemos:

$$[c_\alpha^\dagger c_{-\alpha}^\dagger c_{-\alpha} c_\alpha, c_\beta] = [c_\alpha^\dagger c_{-\alpha}^\dagger, c_\beta] c_{-\alpha} c_\alpha$$

Usar la identidad:

$$[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B.$$

De ahí obtenemos:

$$= \left(C_{\alpha}^{\dagger} \underbrace{\{C_{-\alpha}^{\dagger}, C_{\beta}\}}_0 - \underbrace{\{C_{\alpha}^{\dagger}, C_{\beta}\}}_{\delta_{\alpha\beta}} C_{-\alpha}^{\dagger} \right) C_{-\alpha} C_{\alpha}$$

$$= -\delta_{\alpha\beta} C_{-\beta}^{\dagger} C_{-\alpha} C_{\alpha}.$$

En total:

$$[H, C_{\beta}] = -\epsilon_{\beta} C_{\beta} - C_{-\beta}^{\dagger} \left(\sum_{\alpha > 0} V_{\alpha\beta} C_{-\alpha} C_{\alpha} \right). \quad (2a)$$

Análogamente, para $C_{-\beta}^{\dagger}$ tenemos:

$$[H, C_{-\beta}^{\dagger}] = \epsilon_{\beta} C_{-\beta}^{\dagger} +$$

$$+ \sum_{\substack{\alpha, \alpha' > 0 \\ \alpha \neq \alpha'}} V_{\alpha\alpha'} \left[C_{\alpha}^{\dagger} C_{-\alpha}^{\dagger} C_{-\alpha} C_{\alpha}, C_{-\beta}^{\dagger} \right],$$

y esta vez el conmutador es

$$[C_{\alpha}^{\dagger} C_{-\alpha}^{\dagger} C_{-\alpha} C_{\alpha}, C_{-\beta}^{\dagger}] = C_{\alpha}^{\dagger} C_{-\alpha}^{\dagger} [C_{-\alpha} C_{\alpha}, C_{-\beta}^{\dagger}]$$

$$= C_{\alpha}^{\dagger} C_{-\alpha}^{\dagger} \left(C_{-\alpha} \underbrace{\{C_{\alpha}, C_{-\beta}^{\dagger}\}}_0 - \underbrace{\{C_{-\alpha}, C_{-\beta}^{\dagger}\}}_{\delta_{\alpha\beta}} C_{\alpha} \right)$$

$$= -\delta_{\alpha\beta} C_{\alpha}^{\dagger} C_{-\alpha}^{\dagger} C_{\beta},$$

$$[H, C_{-\beta}^{\dagger}] = \epsilon_{\beta} C_{-\beta}^{\dagger} - \left(\sum_{\alpha' > 0} V_{\beta\alpha'} C_{\alpha'}^{\dagger} C_{-\alpha'}^{\dagger} \right) C_{\beta}. \quad (2b)$$

La Teoría BCS es una aproximación de Campo medio para cerrar las ecuaciones (2a) y (2b). Reemplazamos productos de operadores por sus contracciones en relación al estado BCS:

$$C_{-\alpha} C_{\alpha} \rightarrow \langle C_{-\alpha} C_{\alpha} \rangle_{\text{BCS}} = u_{\alpha} v_{\alpha}$$

$$C_{\alpha}^{\dagger} C_{-\alpha}^{\dagger} \rightarrow \langle C_{\alpha}^{\dagger} C_{-\alpha}^{\dagger} \rangle_{\text{BCS}} = u_{\alpha} v_{\alpha}$$

► Def. Gap superconductor

$$\Delta_{\beta} \equiv - \sum_{\alpha \neq \beta} V_{\alpha\beta} u_{\alpha} v_{\alpha}$$

Así, las ecuaciones (2a) y (2b) se transforman en:

$$[\mathcal{H}, C_{\beta}] = -\epsilon_{\beta} C_{\beta} + \Delta_{\beta} C_{-\beta}^{\dagger}$$

$$[\mathcal{H}, C_{-\beta}^{\dagger}] = \epsilon_{\beta} C_{-\beta}^{\dagger} + \Delta_{\beta}^{*} C_{\beta}$$

Estas ecuaciones pueden ser diagonalizadas con la transformación de Bogoliubov

$$\begin{cases} B_{\alpha} = u_{\alpha} C_{\alpha} - v_{\alpha} C_{-\alpha}^{\dagger} \\ B_{-\alpha}^{\dagger} = v_{\alpha} C_{\alpha} + u_{\alpha} C_{-\alpha}^{\dagger} \end{cases}$$

Si los operadores $(B_{\alpha}, B_{\alpha}^{\dagger})$ dejan \mathcal{H} en la forma diagonal, tendremos:

$$[\mathcal{H}, B_\alpha] = -\Lambda B_\alpha$$

$$= u_\alpha [\mathcal{H}, C_\alpha] - v_\alpha [\mathcal{H}, C_{-\alpha}^\dagger]$$

$$= -\Lambda (u_\alpha C_\alpha - v_\alpha C_{-\alpha}^\dagger)$$

$$= u_\alpha (-\epsilon_\alpha C_\alpha + \Delta_\alpha C_{-\alpha}^\dagger) - v_\alpha (\epsilon_\alpha C_{-\alpha}^\dagger + \Delta_\alpha^* C_\alpha)$$

Es decir:

$$0 = C_\alpha \left((\epsilon_\alpha - \Lambda) u_\alpha + \Delta_\alpha^* v_\alpha \right) + \\ + C_{-\alpha}^\dagger \left(v_\alpha (\Lambda + \epsilon_\alpha) - \Delta_\alpha u_\alpha \right),$$

con las ecuaciones homogéneas:

$$\begin{cases} (\epsilon_\alpha - \Lambda) u_\alpha + \Delta_\alpha^* v_\alpha = 0, \\ -\Delta_\alpha u_\alpha + (\epsilon_\alpha + \Lambda) v_\alpha = 0. \end{cases}$$

La correspondiente ecuación secular es:

$$0 = \begin{vmatrix} \epsilon_\alpha - \Lambda & \Delta_\alpha^* \\ -\Delta_\alpha & \epsilon_\alpha + \Lambda \end{vmatrix} = \epsilon_\alpha^2 - \Lambda^2 + |\Delta_\alpha|^2,$$

con autovalores:

$$\Lambda^2 = \epsilon_\alpha^2 + |\Delta_\alpha|^2,$$

$$\Lambda = \pm \sqrt{\epsilon_\alpha^2 + |\Delta_\alpha|^2}.$$

A diferencia del caso relativista, la estabilidad del estado fundamental implica en aceptar como rama física solamente el caso

$$\Lambda_\alpha = \sqrt{\epsilon_\alpha^2 + |\Delta_\alpha|^2} > 0.$$

Recordemos que el estado $|BCS\rangle$ es el vacío de los operadores B_α .

ϵ_α es la energía de Hartree-Fock de una partícula medida desde el nivel de Fermi. El Hamiltoniano queda en la forma diagonal:

$$\mathcal{H}' = \sum_{\alpha > 0} \sqrt{\epsilon_\alpha^2 + |\Delta_\alpha|^2} B_\alpha^\dagger B_\alpha + E_0,$$

donde E_0 es la energía del estado BCS. En el nivel de Fermi

$$\epsilon_\alpha = 0,$$

y el espectro presenta un gap de tamaño $|\Delta_\alpha|$. Cerca del nivel de Fermi, el problema es equivalente a una teoría de campo de fermiones masivos.

$$\epsilon_\alpha \rightarrow \hbar v_F (k - k_F) = \hbar c \left(\frac{v_F}{c} \right) (k - k_F)$$

$$|\Delta_\alpha| \rightarrow \frac{|\Delta_\alpha|}{c^2} c^2 = mc^2$$

Una vez obtenido el autovalor $\lambda = \sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2}$, podemos calcular los coeficientes (u_α, v_α) , recordando la condición de normalización:

$$u_\alpha^2 + v_\alpha^2 = 1.$$

Las ecuaciones homogéneas nos dan

$$u_\alpha = \frac{\epsilon_\alpha + \lambda}{\Delta_\alpha} v_\alpha = \frac{\epsilon_\alpha + \sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2}}{\Delta_\alpha} v_\alpha$$

$$u_\alpha = - \frac{\Delta_\alpha^*}{\epsilon_\alpha - \lambda} v_\alpha = + \frac{\Delta_\alpha^*}{\sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2} - \epsilon_\alpha} v_\alpha$$

y considerando Δ_α real, $\Delta_\alpha^* = \Delta_\alpha$, obtenemos que multiplicando las dos

$$u_\alpha^2 = \frac{\epsilon_\alpha + \sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2}}{\sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2} - \epsilon_\alpha} v_\alpha^2$$

y

$$\begin{aligned} 1 = u_\alpha^2 + v_\alpha^2 &= v_\alpha^2 \left(1 + \frac{\sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2} + \epsilon_\alpha}{\sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2} - \epsilon_\alpha} \right) \\ &= v_\alpha^2 \frac{\sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2} - \epsilon_\alpha + \sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2} + \epsilon_\alpha}{\sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2} - \epsilon_\alpha} \end{aligned}$$

$$2 v_\alpha^2 =$$

$$2 v_\alpha^2 = \frac{\sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2} - \epsilon_\alpha}{\sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2}}$$

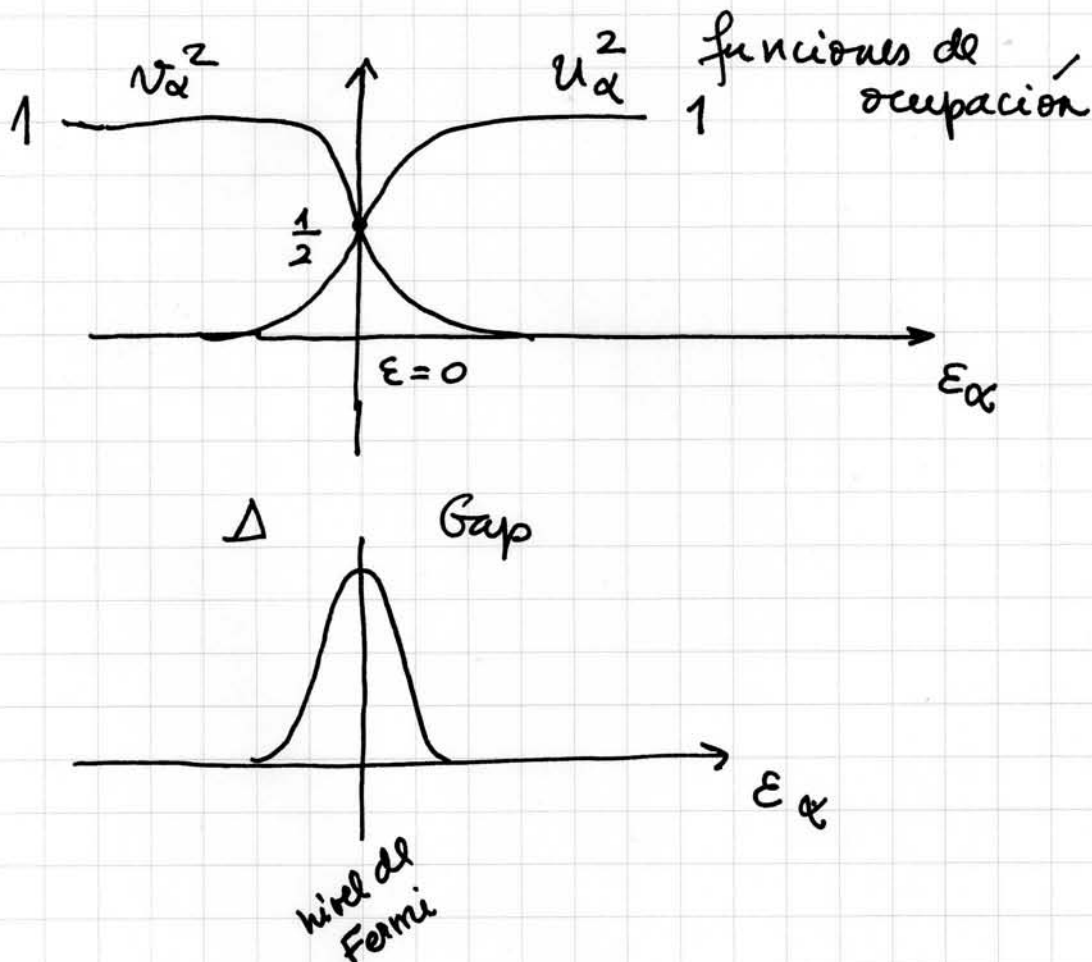
$$v_\alpha^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\epsilon_\alpha}{\sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2}} \right]$$

y en consecuencia, para u_α^2 tenemos:

$$u_\alpha^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\epsilon_\alpha}{\sqrt{\epsilon_\alpha^2 + \Delta_\alpha^2}} \right]$$

Recordemos que ϵ_α es nulo para la energía de Fermi, en torno de la cual abre el gap Δ_α .

Ver gráfico de las funciones:



Tenemos la relación

$$\begin{aligned} |BCS\rangle &= \prod_{\alpha>0} (u_{\alpha} + v_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{-\alpha}^{\dagger}) |0\rangle \\ &= A \prod_{\alpha>0} B_{\alpha} B_{-\alpha} |0\rangle. \end{aligned}$$

El gap del espectro es dado por:

$$\Delta_{\beta} = - \sum_{\alpha \neq \beta} V_{\alpha\beta} u_{\alpha} v_{\alpha} = - \sum_{\alpha \neq \beta} V_{\alpha\beta} \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{-\alpha}^{\dagger} \rangle_{BCS},$$

de manera $|\Delta_{\beta}|$ es interpretado como una energía promedio de ligazón de pares. En la teoría BCS se supone que $V_{\alpha\beta}$ es atractivo (debilmente) y que Δ_{β} es independiente de $\beta = (\vec{k}, \sigma)$, con la forma simple:

$$V_{\vec{k}\vec{k}'} = \begin{cases} -|V_0|, & \text{para } |\epsilon_{\vec{k}} - \mu|, |\epsilon_{\vec{k}'} - \mu| < \hbar\omega_c, \\ 0, & \text{para los otros casos.} \end{cases}$$

μ es el potencial químico (energía de Fermi a $T=0^{\circ}K$) y ω_c es una frecuencia de "cut-off" del orden del ω_D de Debye.

Veamos ahora que son las excitaciones sobre el estado fundamental BCS:

$$B_{-\beta}^{\dagger} |BCS\rangle = A B_{-\beta}^{\dagger} \prod_{\alpha>0} B_{\alpha} B_{-\alpha} |0\rangle, \quad \beta>0$$

Tenemos que analizar el factor

$$B_{-\beta}^{\dagger} B_{\beta} B_{-\beta} |0\rangle = (v_{\beta}^{\dagger} (v_{\beta} c_{\beta} + u_{\beta} c_{-\beta}^{\dagger})) (u_{\beta} + v_{\beta} c_{\beta}^{\dagger} c_{-\beta}^{\dagger}) |0\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \sigma_\beta \left(u_\beta^2 C_{-\beta}^\dagger + u_\beta v_\beta \underbrace{C_{-\beta}^\dagger C_\beta C_{-\beta}^\dagger}_0 + u_\beta v_\beta \underbrace{C_\beta}_0 + v_\beta^2 C_\beta C_\beta^\dagger C_{-\beta}^\dagger \right) |0\rangle \\
&= \sigma_\beta \left(u_\beta^2 C_{-\beta}^\dagger + v_\beta^2 C_{-\beta}^\dagger C_\beta C_\beta^\dagger \right) |0\rangle = \sigma_\beta C_{-\beta}^\dagger (u_\beta^2 + v_\beta^2 C_\beta C_\beta^\dagger) |0\rangle \\
&= \sigma_\beta C_{-\beta}^\dagger (u_\beta^2 + v_\beta^2 (1 - C_\beta^\dagger C_\beta)) |0\rangle = \sigma_\beta C_{-\beta}^\dagger (u_\beta^2 + v_\beta^2) |0\rangle \\
&= \sigma_\beta C_{-\beta}^\dagger |0\rangle.
\end{aligned}$$

Para el estado BCS tenemos:

$$B_{-\beta}^\dagger |BCS\rangle = A' \sigma_\beta C_{-\beta}^\dagger \prod_{\substack{\alpha > 0 \\ \alpha \neq \beta}} B_\alpha B_{-\alpha} |0\rangle,$$

de manera que el par $(\beta, -\beta)$ fue quebrado. Proseguimos ahora con B_β^\dagger :

$$B_\beta^\dagger (B_{-\beta}^\dagger |BCS\rangle) = A' \sigma_\beta B_\beta^\dagger C_{-\beta}^\dagger \prod_{\substack{\alpha > 0 \\ \alpha \neq \beta}} B_\alpha B_{-\alpha} |0\rangle.$$

Necesitamos analizar:

$$\begin{aligned}
&(u_\beta C_\beta^\dagger - v_\beta C_{-\beta}) C_{-\beta}^\dagger |0\rangle = (-v_\beta C_{-\beta} C_{-\beta}^\dagger + u_\beta C_\beta^\dagger C_{-\beta}^\dagger) |0\rangle \\
&= \left[-v_\beta (1 - C_{-\beta}^\dagger C_{-\beta}) + u_\beta C_\beta^\dagger C_{-\beta}^\dagger \right] |0\rangle \\
&= (-v_\beta + u_\beta C_\beta^\dagger C_{-\beta}^\dagger) |0\rangle.
\end{aligned}$$

Así:

$$B_\beta^\dagger B_{-\beta}^\dagger |BCS\rangle = A'' (\sigma_\beta - u_\beta C_\beta^\dagger C_{-\beta}^\dagger) \prod_{\substack{\alpha > 0 \\ \alpha \neq \beta}} (u_\alpha + v_\alpha C_\alpha^\dagger C_{-\alpha}^\dagger) |0\rangle.$$

Para interpretar este resultado, recordamos que

$$u_\beta^2 + v_\beta^2 = 1$$

y que v_β^2 representa la distribución de Fermi ($T=0^{\circ}\text{K}$) para $\Delta \rightarrow 0$. Así, cuando los pares $C_\alpha^+ C_{-\alpha}^+$ están ocupados ($v_\alpha \approx 1$), el par $C_\beta^+ C_{-\beta}^+$ está desocupado y vice-versa. En el estado $B_\beta^+ B_{-\beta}^+ |BCS\rangle$ hemos eliminado el par $(\beta, -\beta)$, con un costo de energía

$$2 E_\beta = 2 \sqrt{\epsilon_\beta^2 + |\Delta_\beta|^2}.$$

Cualquiera perturbación física que apliquemos sobre el estado $|BCS\rangle$ contiene como mínimo dos operadores de electrones (uno de creación y otro de destrucción), porque las perturbaciones usuales con campos eléctricos y magnéticos son más bien efectos de scattering de electrones (sin crear ni destruir partículas). Tendríamos algo así como

$$\begin{aligned} (\alpha' \neq \alpha) \quad C_{\alpha'}^+ C_\alpha |BCS\rangle &= \\ &= (u_\alpha B_\alpha^+ + v_\alpha B_{-\alpha}^+) (u_{\alpha'} B_{\alpha'} + v_{\alpha'} B_{-\alpha'}^+) |BCS\rangle \\ &= u_\alpha v_{\alpha'} B_\alpha^+ B_{-\alpha'}^+ |BCS\rangle. \end{aligned}$$

Por lo tanto, solamente pares de cuasi-partículas pueden ser excitados y la energía mínima para crear un par de excitaciones será

$$2\Delta.$$

Comparar con el análogo relativista de creación de un par partícula-antipartícula

La función de prueba ("trial wave function") BCS fue construida considerando los parámetros (u_α, v_α) como siendo reales. Pero también es posible que sean complejos, de manera que existiría una fase relativa que llamamos ϕ_α :

$$u_\alpha \text{ real}, \quad v_\alpha = v_\alpha e^{i\phi_\alpha}, \quad v_\alpha \text{ real}$$

En este caso encontramos que ϕ_α es una fase independiente de $\alpha = \{\vec{k}, \sigma\}$,

$$\phi_\alpha = \phi,$$

y que la energía no depende de ϕ . La función de onda es ahora infinitamente degenerada

$$|BCS\rangle_\phi = \prod_{\alpha>0} (u_\alpha + v_\alpha e^{i\phi} c_\alpha^\dagger c_{-\alpha}^\dagger) |0\rangle,$$

de manera que "un estado fundamental" elige una fase determinada ϕ y que elbra espontáneamente una simetría continua. Este hecho está asociado con la propiedad de que el número de partículas no está definido no estado $|BCS\rangle$. A fase do estado $|BCS\rangle$ es una propiedad muy importante en problemas como el efecto Josephson, donde los superconductores están acoplados por una barrera de potencial y los electrones sufren efecto túnel de un superconductor para el otro