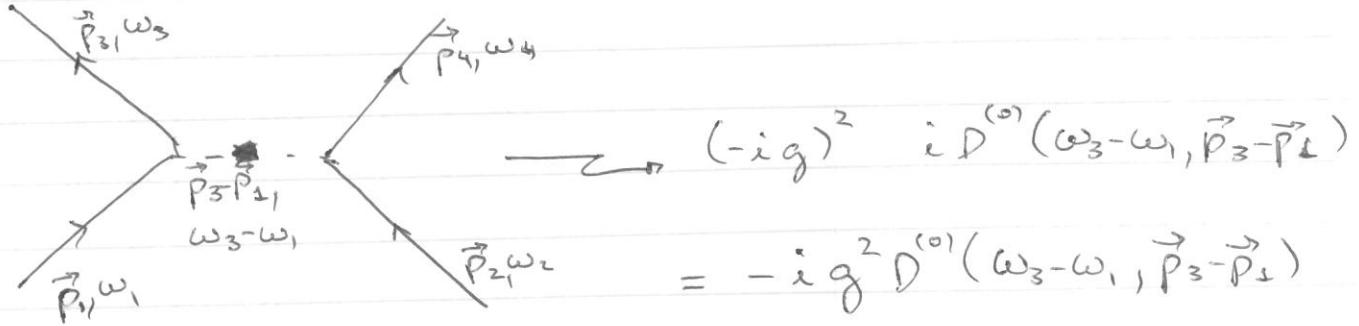


Não vamos nos deter na análise do problema elétron-fônon. Vamos apenas analisar a troca de fônon por 2 elétrons, representada por um vértice efetivo



Note a similaridade com uma interação direta se:

$$U(\omega, \vec{q}) \rightarrow q^2 D^{(o)}(\omega, \vec{q})$$

Uma importante diferença é a forte dependência com a frequência que reflete a natureza retardada da interação. Além disso, quando:

$$|\omega_3 - \omega_1| < \omega_0(\vec{p}_3 - \vec{p}_1) \Rightarrow U(\omega, \vec{q}) \approx -q^2$$

a interação efetiva entre os elétrons é atrativa!  
Notem que

$$\omega_0(\vec{p}) = c p \sim \omega_0 \sim 10^{-2} E_F$$

Ou seja, as freqüências de vibração da rede, da ordem da freqüência de Debye  $\omega_0$ , não tipicamente 2 ordens de grandeza menores que a energia de Fermi. Portanto, a interação efetiva é atrativa quando a transferência de energia eletrônica pertence a uma estreita faixa de largura  $\omega_0$ .

## Modelo simplificado de interação e-ph

A interação elétron-fônon pode ser descrita num modelo simplificado como:

$$H_{e-ph} = g \int \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^+ (\vec{r}) \psi_{\alpha} (\vec{r}) \varphi (\vec{r}) d^3 r$$

onde  $g$  é uma constante de acoplamento e  $\varphi (\vec{r})$  é associado ao campo de deslocamento da rede iônica em relação à posição de equilíbrio.

Além disso,  $\varphi (\vec{r})$ , que é um campo barônico tem o seguinte propagador (função de Green)

$$i D^{(0)}(s, z) = \langle T [\varphi(\vec{r}_1, t_1) \varphi(\vec{r}_2, t_2)] \rangle$$

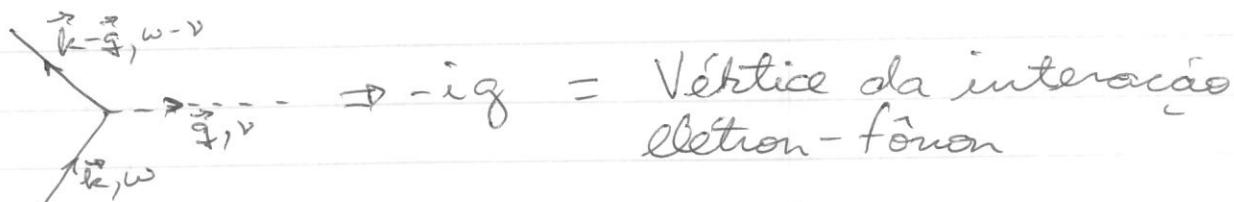
cuja transformada de Fourier é:

$$D^{(0)}(\omega, \vec{k}) = \frac{\omega_0(\vec{k})}{\omega^2 - \omega_0(\vec{k}) + i\delta}$$

onde  $\omega_0(\vec{k}) = c k$  é a dispersão dos fônonos acústicos e  $c$  é a velocidade do som.

A interação acima indica diagramas de Feynman que são facilmente deduzidos:

---  $\rightarrow$  ---  $\Rightarrow i D^{(0)}(\omega, \vec{k}) =$  Função de Green dos fônonos  
(não-interagente)



Vamos assumir um modelo simplificado em que retemos apenas a parte atrativa da interação (assumida constante) entre elétrons cuja energia pertence a uma faixa de largura  $2\omega_0$  em torno da superfície de Fermi:

$$H_{int} = + \frac{\lambda}{2} \sum_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} \begin{cases} C_{\vec{k}_1 + \vec{q}}^+ C_{\vec{k}_2 - \vec{q}, \sigma_1}^+ C_{\vec{k}_2, \sigma_1}^- C_{\vec{k}_1, \sigma_0}^- \\ \text{if } \vec{q} \in \Omega \\ 0 \text{ otherwise} \end{cases}$$

$$= + \lambda \int d^3z \quad \psi_{\sigma_0}^*(\vec{z}) \psi_{\sigma_1}^*(\vec{z}) \psi_{\sigma_1}(\vec{z}) \psi_{\sigma_0}(\vec{z})$$

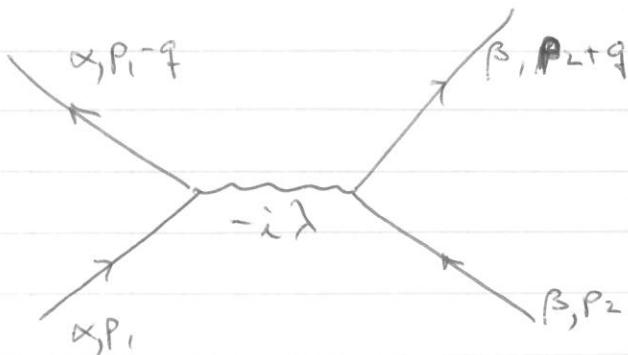
Como vimos, dentro da faixa de energia de largura  $\omega_0$  em torno da Superfície de Fermi  $\lambda < 0$ .

A restrições:

$$\left\{ \begin{array}{l} |\epsilon(\vec{k}_1)| < \omega_0 \\ |\epsilon(\vec{k}_2)| < \omega_0 \\ |\epsilon(\vec{k}_1 + \vec{q})| < \omega_0 \\ |\epsilon(\vec{k}_2 - \vec{q})| < \omega_0 \end{array} \right.$$

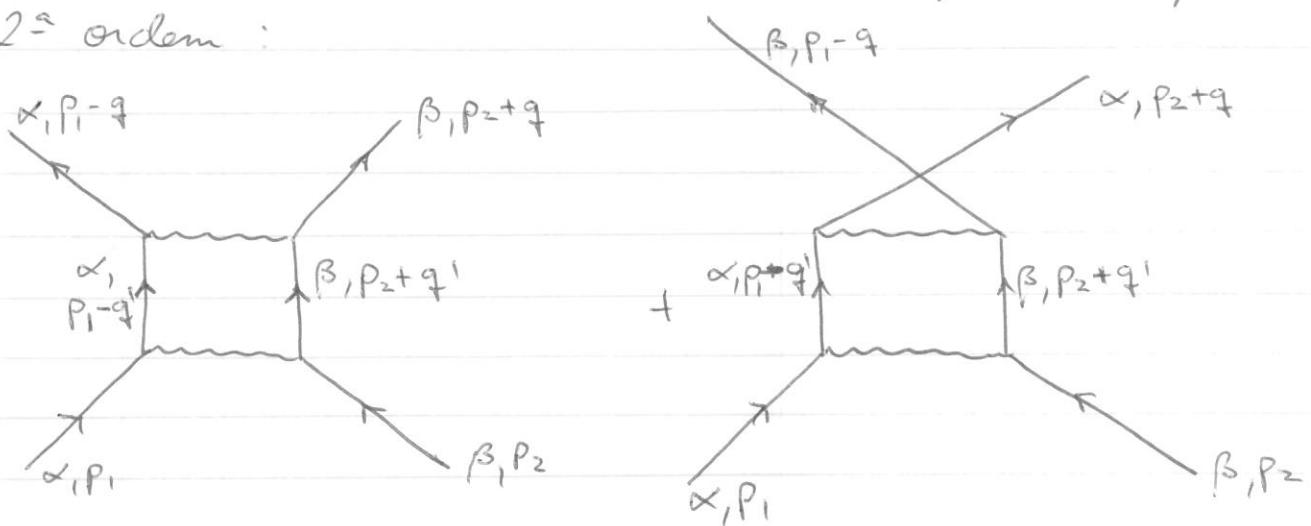
é implicita no Hamiltoniano acima

Para melhor entender a origem da instabilidade se vamos analisar perturbativamente a interação e-e. O vértice básico é:



Todos os momentos  
 $\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{p}_2 - \vec{q} \text{ e } \vec{p}_2 + \vec{q}$   
 satisfazem  
 $|\epsilon(\vec{p}_i)| < \omega_0$

Vimos nos concentrar no chamado canal partícula-partícula em 2ª ordem:



A contribuição numérica de ambos os diagramas é a mesma, mas o segundo tem um sinal negativo devido à troca das pernas externas finais (exchange). Isto vem das regras para diagramas com 4 pernas externas, que estudamos. A estrutura interna é simples. Se somarmos com a contribuição em 1ª ordem temos:

$$-i\Gamma_d^{(2)} = -i\lambda + (-i\lambda)^2 (i)^2 \int G^{(0)}(p_1 - q') G^{(0)}(p_2 + q') \frac{d^4 q'}{(2\pi)^4}$$

$$\Gamma_d^{(2)} = \lambda + i\lambda^2 \int G^{(0)}(p_1 - q') G^{(0)}(p_2 + q') \frac{d^4 q'}{(2\pi)^4}$$

O sufixo d indica o diagrama direto. Vamos fazer a seguinte troca de variáveis na integral

$$\begin{aligned} \vec{q}_1' &\rightarrow \vec{q}' - \vec{p}_2 \\ \vec{q}' &\rightarrow \vec{q} \end{aligned}$$

$$\vec{k} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 \quad \text{onde} \quad \begin{cases} \vec{q} = (\nu, \vec{q}) \\ \vec{k} = (\omega, \vec{k}) \end{cases}$$

$$\Gamma_d^{(2)} = \lambda + i\lambda^2 \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} G^{(0)}(\vec{q}') G^{(0)}(\vec{k} - \vec{q}') \equiv \lambda + i\lambda^2 I(\vec{k})$$

Usando que:  $G^{(0)}(\vec{q}') = \frac{1}{\nu - \epsilon_{\vec{q}} + i\eta \operatorname{sgn}(\vec{q} - \vec{k}_F)}$

$$I(\vec{k}) = \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \left\{ \Theta(k_F - q) \Theta(|\vec{k} - \vec{q}|) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv}{2\pi} \frac{1}{(\nu - \epsilon_1 - i\eta)(\omega - \nu - \epsilon_2 - i\eta)} \right. \\ \left. + \Theta(q - k_F) \Theta(|\vec{k} - \vec{q}| - k_F) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv}{2\pi} \frac{1}{(\nu - \epsilon_1 + i\eta)(\omega - \nu - \epsilon_2 + i\eta)} \right\}$$

onde  $\epsilon_1 = \epsilon(\vec{q})$  e  $\epsilon_2 = \epsilon(\vec{k} - \vec{q})$ , de tal forma que os pôlos só ficam sempre em semi-planos opostos. Fechando a integração por um semi-círculo de raio infinito no semi-plano superior em ambos os casos acima:

$$I(\vec{k}) = i \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{\Theta(k_F - q) \Theta(|\vec{k} - \vec{q}|)}{\omega - \epsilon_1 - \epsilon_2 - i\eta} - \frac{\Theta(q - k_F) \Theta(|\vec{k} - \vec{q}| - k_F)}{\omega - \epsilon_1 - \epsilon_2 + i\eta} \right\}$$

A integração acima deve também estar restrita pelas condições:

$$|\epsilon(\vec{q})| < \omega_D$$

$$\quad \text{e} \quad |\epsilon(\vec{k} - \vec{q})| < \omega_D$$

Vamos fazer o cálculo acima no caso:

$$V_F k, \omega \ll \omega_0$$

Nesse caso, considerando que  $\omega_0 \ll E_F$ , podemos nos concentrar na região próxima ao nível de Fermi e escrever:

$$\epsilon(\vec{q}) = \frac{q^2}{2m} - \frac{k_F^2}{2m} \approx \frac{k_F}{m} (q - k_F) = V_F (q - k_F)$$

$$\begin{aligned} \epsilon(\vec{k} - \vec{q}) &= \frac{k^2}{2m} + \frac{q^2}{2m} - \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m} - \frac{k_F^2}{2m} \approx V_F (q - k_F) - \frac{\vec{k} \cdot \vec{q}}{m} \\ &= V_F (q - k_F) - V_F k \cos \theta \end{aligned}$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre  $\vec{k}$  e  $\vec{q}$ . As condições ( $\mu = \cos \theta$ )

$$|\epsilon(\vec{q})| < \omega_0 \Rightarrow |V_F (q - k_F)| < \omega_0$$

$$|\epsilon(\vec{k} - \vec{q})| < \omega_0 \Rightarrow |V_F (q - k_F) - V_F k \mu| < \omega_0$$

A integração sobre  $\vec{q}$  pode ser escrita ( $\xi \equiv V_F (q - k_F)$ )

$$\int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} = \int \frac{q^2 dq}{(2\pi)^3} 2\pi d(\cos \theta) \approx \frac{k_F^2}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dq \int_{-1}^{+1} d\mu \approx \frac{k_F^2}{4\pi^2 V_F} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-1}^{+1} d\mu$$

$$= \frac{mk_F}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-1}^{+1} d\mu = \frac{s_0(E_F)}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-1}^{+1} d\mu$$

onde  $s_0(E_F) = \frac{m k_F^2}{2\pi^2}$   
é a densidade de estados na energia de Fermi (por projeção de spin)

Assim:

$$\Theta(k_F - q) \Rightarrow \epsilon(\vec{q}) < 0 \Rightarrow \tilde{\omega} < 0$$

$$\Theta(|\vec{k} - \vec{q}|) \Rightarrow \epsilon(\vec{k} - \vec{q}) < 0 \Rightarrow \tilde{\omega} - V_F k \mu < 0$$

que, combinadas com  $|\tilde{\omega}| < \omega_0$  e  $|\tilde{\omega} - V_F k \mu| < \omega_0$  nos dão

$$-\omega_0 < \tilde{\omega} < 0 \quad \text{e} \quad -\omega_0 < \tilde{\omega} - V_F k \mu < 0 \Rightarrow -\omega_0 \leq \tilde{\omega} < V_F k \mu$$

E: seja,  $-\omega_0 < \tilde{\omega} < \min(0, V_F k \mu)$

Analogamente:  $\Theta(q - k_F) \Rightarrow \tilde{\omega} > 0$ ;  $\Theta(|\vec{k} - \vec{q}| - k_F) \Rightarrow \tilde{\omega} - V_F k \mu >$

$$\Rightarrow 0 < \tilde{\omega} < \omega_0 \quad \text{e} \quad 0 < \tilde{\omega} - V_F k \mu < \omega_0 \Rightarrow V_F k \mu < \tilde{\omega} < \omega_0$$

ou seja,  $\max(0, V_F k \mu) < \tilde{\omega} < \omega_0$

Assim:

$$I(k) = i \frac{s_0(E_F)}{2} \left\{ \int_{-1}^{+1} du \int_{-\omega_0}^{\min(0, V_F k \mu)} d\tilde{\omega} \frac{1}{\omega - 2\tilde{\omega} + V_F k \mu - i\eta} - \right.$$

$$\left. - \int_{-1}^{+1} du \int_{\max(0, V_F k \mu)}^{\omega_0} d\tilde{\omega} \frac{1}{\omega - 2\tilde{\omega} + V_F k \mu + i\eta} \right\}$$

$$\{ \int_{-w_0}^0 du \int_{-1}^0 d\tilde{\omega} + \int_{-w_0}^0 du \int_{-w_0}^{V_F k \mu} d\tilde{\omega} \frac{1}{\omega - 2\tilde{\omega} + V_F k \mu - i\eta} -$$

$$- \int_{-w_0}^{w_0} du \int_{V_F k \mu}^{w_0} d\tilde{\omega} - \int_{-1}^0 du \int_{-w_0}^{w_0} d\tilde{\omega} \frac{1}{\omega - 2\tilde{\omega} + V_F k \mu + i\eta}$$

A primeira e a quarta integrais dão:

$$\int_0^\infty du \int_{-\omega_0}^{\omega_0} d\tilde{\omega} \left[ \frac{1}{\omega - 2\tilde{\omega} + V_F k u - i\eta} + (\omega \rightarrow -\omega) \right] =$$

$$= \int_0^\infty du \int_{-\omega_0}^{\omega_0} d\tilde{\omega} \left[ \frac{1}{\omega + 2\tilde{\omega} + V_F k u - i\eta} + (\omega \rightarrow -\omega) \right]$$

~~sinal mágico~~

A segunda e a terceira ficam:

$$\int_0^\infty du \int_{-\omega_0}^{\omega_0} d\tilde{\omega} \left[ \frac{1}{\omega - 2\tilde{\omega} + V_F k u + i\eta} + (\omega \rightarrow -\omega) \right] =$$

$$= \int_0^\infty du \int_{-\omega_0}^{\omega_0} d\tilde{\omega} \left[ \frac{1}{\omega + 2\tilde{\omega} - V_F k u - i\eta} + (\omega \rightarrow -\omega) \right]$$

Fazendo  $\tilde{\omega} \rightarrow \tilde{\omega} + V_F k u$  na última integral e fazendo  $\omega_0 - V_F k u \approx \omega_0$

$$= \int_0^\infty du \int_0^{\omega_0} d\tilde{\omega} \left[ \frac{1}{\omega + 2\tilde{\omega} + V_F k u - i\eta} + (\omega \rightarrow -\omega) \right]$$

que é igual à primeira. Assim:

$$I(k) = i S_0(E_F) \int_0^\infty du \int_0^{\omega_0} d\tilde{\omega} \left[ \frac{1}{\omega + 2\tilde{\omega} + V_F k u - i\eta} + (\omega \rightarrow -\omega) \right]$$

Vamos calcular os partes real e imaginária. A parte imaginária é:

$$\pi \int_0^\infty du \int_0^{\omega_0} d\tilde{\omega} \delta(\omega + 2\tilde{\omega} + V_F k u) + (\omega \rightarrow -\omega)$$

A integração sobre  $\frac{d\zeta}{\zeta}$  da ( $2\zeta = -V_F k \mu - \omega > 0$ ):

$$\frac{\pi}{2} \int_0^1 d\mu \Theta\left(\frac{|\omega|}{V_F k} - \mu\right) \Theta(-\omega) + (\omega \rightarrow -\omega)$$

$$= \frac{\pi}{2} \Theta(-\omega) \min\left(1, \frac{|\omega|}{V_F k}\right) + (\omega \rightarrow -\omega) = \boxed{\frac{\pi}{2} \min\left(1, \frac{|\omega|}{V_F k}\right)}$$

A parte real fica: ( $P$  = parte principal)

$$P \int_0^1 d\mu \int_0^{w_0} \frac{1}{\omega + 2\zeta + V_F k \mu} + (\omega \rightarrow -\omega)$$

$$\Rightarrow P \int_0^1 \frac{d\mu}{2} \ln \left| \frac{\omega + 2w_0 + V_F k \mu}{\omega + V_F k \mu} \right| \approx -P \int_0^1 \frac{d\mu}{2} \ln \left| \frac{\omega + V_F k \mu}{2w_0} \right|$$

Usando que  $\int d\mu \ln \left| \frac{\omega + V_F k \mu}{2w_0} \right| = \frac{1}{V_F k} \left\{ (\omega + V_F k \mu) \ln \left| \frac{\omega + V_F k \mu}{2w_0} \right| - V_F k \mu \right\}$

$$= -\frac{1}{2V_F k} \left\{ (\omega + V_F k) \ln \left| \frac{\omega + V_F k}{2w_0} \right| - \omega \ln \left| \frac{\omega}{2w_0} \right| - V_F k \right\}$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln \left| \frac{2w_0}{\omega + V_F k} \right| + \frac{1}{2} \left( \frac{\omega}{V_F k} \right) \ln \left| \frac{\omega}{\omega + V_F k} \right|$$

Somando com ( $\omega \rightarrow -\omega$ ):

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln \left| \frac{(2w_0)^2}{\omega^2 - (V_F k)^2} \right| + \frac{1}{2} \left( \frac{\omega}{V_F k} \right) \ln \left| \frac{\omega - V_F k}{\omega + V_F k} \right|$$

$$\Rightarrow I(k) = i S_0(E_F) \left\{ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln \left| \frac{(2w_0)^2}{\omega^2 - (V_F k)^2} \right| + \frac{1}{2} \left( \frac{\omega}{V_F k} \right) \ln \left| \frac{\omega - V_F k}{\omega + V_F k} \right| + i \frac{\pi}{2} \min\left(1, \frac{|\omega|}{V_F k}\right) \right\}$$

Particularizando para  $\vec{k} = 0 \Rightarrow \vec{p}_1 = -\vec{p}_2$

$$I(k) = i \beta_0(E_F) \left\{ \ln \left| \frac{2\omega_D}{\omega} \right| + i \frac{\pi}{2} \right\}$$

$$\text{pois } \frac{\omega \ln \left| \frac{\omega - V_F k}{\omega + V_F k} \right|}{V_F k} \xrightarrow[k \rightarrow 0]{} -2 - \frac{2}{3} \left( \frac{V_F k}{\omega} \right)^2 + O \left( \frac{V_F k}{\omega} \right)^4$$

Vemos que  $I(k)$  diverge logarítmicamente quando  $\omega \rightarrow 0$ . Esta divergência nos leva a ter que resomar a série perturbativa:

$$\begin{aligned} \Gamma_d &= \lambda + i\lambda^2 I(k) - \lambda^3 I^2(k) + \dots \\ &= \lambda \left[ 1 + i\lambda I(k) - \lambda^2 I^2(k) \right] = \frac{\lambda}{1 - i\lambda I(k)} \end{aligned}$$

ou diagramaticamente:



$$\Gamma_d(k) = \frac{\lambda}{1 + \lambda \beta_0(E_F) \left[ \ln \left| \frac{2\omega_D}{\omega} \right| + i \frac{\pi}{2} \right]}$$

Se continuarmos analiticamente o vértice de interacão para o plano complexo superior  $w \rightarrow z$

$$\Gamma_d(z, \vec{k} = \vec{0}) = \frac{\lambda}{1 + \lambda S_0(E_F) \left[ \ln \left| \frac{2w_0}{z} \right| + i \frac{\pi}{2} - i \arg(z) \right]}$$

A expressão acima têm um pólo quando  $\lambda < 0$  em:

$$\left. \begin{aligned} |z| &= 2w_0 \exp \left[ -\frac{1}{S_0(E_F)(\lambda)} \right] \\ &\equiv R_c \end{aligned} \right\} \Rightarrow \text{Pólo em } z_0$$

$$\arg(z) = \frac{\pi}{2} \qquad \qquad \qquad z_0 = iR_c$$

Expandido em torno do pólo temos:

$$\boxed{\Gamma_d(z, \vec{k} = \vec{0}) \approx -\frac{1}{S(E_F)} \frac{iR_c}{z - iR_c}}$$

Lembremos que o vértice de interacão está ligado à função de Green de 2 corpos (que não exploramos muito). Um pólo complexo nessa função de Green sinaliza a formação de estados ligados de 2 partículas e a instabilidade do estado fundamental interagente à formação de um novo estado qualitativamente diferente do estado não interagente. A energia  $R_c$  é uma medida da energia de ligação do par. E o momento total do par

$\vec{P} = \vec{P}_1 + \vec{P}_2 = 0$  indica que são ~~mesmos~~ pares cuja forma será importante:

$$\boxed{\vec{P}_1 = -\vec{P}_2}$$

Se  $\vec{k} \neq \vec{0}$ , pode-se mostrar que o polo se move. Se  $V_F k \ll R_c$ :

$$\Gamma(z, \vec{k}) = -\frac{1}{S(E)} \frac{i R_c}{z - i \left( R_c - \frac{V_F^2 k^2}{6 R_c^2} \right)}$$

O polo se move na direção do eixo real

Em  $R_{max}$  dado por:

$$V_F R_{max} = e R_c$$

O polo encontra o eixo real e desaparece. Assim, apenas os pares:

$$\vec{P}_1 \approx -\vec{P}_2$$

apresentam tendência ao emparelhamento.

## Teoria BCS:

A teoria BCS começa por focalizar um Hamiltoniano efetivo com atrações apenas entre elétros de momentos e spins opostos. ( $\lambda > 0$  abaixo)

$$H = \sum_{\vec{p} \neq 0} \left( \frac{\vec{p}^2}{2m} \right) a_{\vec{p}, \sigma}^\dagger a_{\vec{p}, \sigma} - \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \sum_{\vec{p} \vec{p}'} a_{\vec{p}, +}^\dagger a_{-\vec{p}', -}^\dagger - a_{-\vec{p}, -} a_{\vec{p}, +}$$

Como vimos no caso do gás de Fermi diluído imperfeito para uma interação de curto alcance como supostamente acima (não há dependência nenhuma com a transferência de momento  $\vec{p}' - \vec{p}$ ), a interação se dá apenas entre Fermis de spins opostos

$$(\vec{p}, +) \text{ e } (-\vec{p}, -)$$

por causa da anticomutação dos operadores fermionicos.

O Hamiltoniano é agora tratado em teoria de campo médio. A observação crucial é que o "parâmetro de ordem" em questão envolve a criação ou a destruição de um par:

$$a_{-\vec{p}, -}^\dagger a_{\vec{p}, +}^\dagger \longrightarrow A_{\vec{p}} + \underbrace{(a_{-\vec{p}, -} a_{\vec{p}, +} - A_{\vec{p}})}_{\text{pequeno} = \delta_{\vec{p}}}$$

O parâmetro de ordem  $A_{\vec{p}}$  pode ser encarado como sendo o elemento de matriz:

$$A_{\vec{p}} = \langle N-2 | a_{-\vec{p}, -} a_{\vec{p}, +} | N \rangle_0$$

entre os estados fundamentais de  $N$  e  $N-2$  partículas!

Fisicamente, o estado interagente  $|N\rangle$  se caracteriza pela presença de um número macroscópico de pares dos estados  $(\vec{p}, +)$  ( $(-\vec{p}, -)$ ) simultaneamente ocupados. É o chamado CONDENSADO SUPERCONDUTOR. Por isso, existe um overlap muito grande entre:

$$a_{-\vec{p}} a_{\vec{p}+} |N\rangle \approx |N-2\rangle.$$

Vamos proceder com os cálculos. Trabalhando agora com  $H - \mu N$  (pois o Hamiltoniano não conserva o número total de partículas!):

$$H = \sum_{\vec{p}\sigma} \epsilon(\vec{p}) a_{\vec{p}\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma} - \frac{\lambda}{V} \sum_{\vec{p}\vec{p}'} [ (A_{\vec{p}'}^* + S_{\vec{p}'}^*) (A_{\vec{p}} + S_{\vec{p}}) ]$$

$$[ ] \approx A_{\vec{p}'}^* A_{\vec{p}} + A_{\vec{p}} S_{\vec{p}'}^+ + A_{\vec{p}'}^* S_{\vec{p}}$$

$$\begin{aligned} &= A_{\vec{p}'}^* A_{\vec{p}} + A_{\vec{p}} (a_{\vec{p}'}^+ + a_{-\vec{p}'}^- - A_{\vec{p}'}^*) + A_{\vec{p}'}^* (a_{-\vec{p}} - a_{\vec{p}+} - A_{\vec{p}}) \\ &= - A_{\vec{p}'}^* A_{\vec{p}} + A_{\vec{p}} a_{\vec{p}'}^+ + a_{-\vec{p}'}^- + A_{\vec{p}'}^* a_{-\vec{p}} - a_{\vec{p}+} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow H \approx \sum_{\vec{p}\sigma} \epsilon(\vec{p}) a_{\vec{p}\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma} - \frac{\lambda}{V} \left[ \left( \sum_{\vec{p}} A_{\vec{p}} \right) \sum_{\vec{p}'} a_{\vec{p}'}^+ a_{-\vec{p}'}^- + \left( \sum_{\vec{p}'} A_{\vec{p}'}^* \right) \sum_{\vec{p}} a_{-\vec{p}} - a_{\vec{p}+} \right. \\ \left. - \left( \sum_{\vec{p}'} A_{\vec{p}'}^* \right) \left( \sum_{\vec{p}} A_{\vec{p}} \right) \right]$$

Definindo  $\Delta_{\vec{p}} = - \frac{\lambda}{V} \sum_{\vec{p}} A_{\vec{p}}$

$$H = \sum_{\vec{p}\sigma} \epsilon(\vec{p}) a_{\vec{p}\sigma}^+ a_{\vec{p}\sigma} + \sum_{\vec{p}} (\Delta^* a_{-\vec{p}-} a_{\vec{p}+} + \text{H.c.}) + \frac{\Delta^2 V}{\lambda}$$

Para diagonalizar esse Hamiltoniano é conveniente introduzir uma notação devida a Nambu e Gorkov. Definimos:

$$A_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} a_{k\uparrow} \\ + \\ a_{-k\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$A_{\vec{k}}^+ = (a_{k\uparrow}^+ \ a_{-k\downarrow})$$

\* Infelizmente, eu comecei a usar  $A_{\vec{k}}$  para o spinor e para  $(a_{-k\downarrow}^+ \ a_{k\uparrow}^+)$  e só descobri tarde demais 😞

como um spinor no espaço "particularizado". Esse é um espaço  $2 \times 2$  que não tem nada a ver com o espaço de spin  $\frac{1}{2}$ .

Queremos usar as matrizes de Pauli para escrever operadores nesse espaço. Para não confundirmos com o espaço de spin, usaremos as matrizes:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_1, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \sigma_2, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_3$$

que, juntamente com a matriz unidade  $\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ , formam a base completa nesse espaço. Assim, podemos escrever:

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\vec{k} \in S} \epsilon(\vec{k}) [a_{\vec{k}\uparrow}^+ a_{\vec{k}\uparrow} + a_{\vec{k}\downarrow}^+ a_{\vec{k}\downarrow}] \\ &= \sum_{\vec{k} \in S} [\epsilon(\vec{k}) a_{\vec{k}\uparrow}^+ a_{\vec{k}\uparrow} + \epsilon(-\vec{k}) a_{-\vec{k}\downarrow}^+ a_{-\vec{k}\downarrow}] \\ &= \sum_{\vec{k} \in S} [\epsilon(\vec{k}) a_{\vec{k}\uparrow}^+ a_{\vec{k}\uparrow} - \epsilon(\vec{k}) a_{\vec{k}\downarrow}^+ a_{\vec{k}\downarrow} + \epsilon(-\vec{k})] \end{aligned}$$

Se  $\epsilon(-\vec{k}) = \epsilon(\vec{k})$  (o que é consequência da invariância por reversão temporal)

$$\Rightarrow H_0 = \sum_{\vec{k} \in S} A_{\vec{k}}^+ (\epsilon(\vec{k}) \sigma_3) A_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k} \in S} \epsilon(\vec{k})$$

Além disso:

$$H_1 = \sum_{\vec{k}} [\Delta^* c_{-\vec{k}} - a_{\vec{k}\downarrow} + H.c.]$$

Se  $\Delta = \Delta' + i\Delta''$  onde  $\Delta', \Delta'' \in \mathbb{R}$

$$\Rightarrow H_1 = \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}}^\dagger (\Delta' c_1 - \Delta'' c_2) A_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}}^\dagger [L(\Delta c^+ + \Delta^* c^-)] A_{\vec{k}}$$

Onde, como usual,  $c^\pm = c_1 \pm i c_2$ . Sem perda de generalidade (esse ponto pode ser melhor esclarecido e é bastante importante) podemos supor  $\Delta \in \mathbb{R}$  e

$$H_1 = \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}}^\dagger (\Delta c_1) A_{\vec{k}}$$

Assim:

$$H = H_0 + H_1 + \frac{V\Delta^2}{\lambda} = \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}}^\dagger (\epsilon(\vec{k}) c_3 + \Delta c_1) A_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) + \frac{V\Delta^2}{\lambda}$$

Assim, temos que, para cada valor de  $\vec{k}$ , podemos diagonalizar  $H$  através de uma "rotacão" no espaço  $2 \times 2$  de Nambu-Gorkov (partícula-buoco):

$$H = \epsilon c_3 + \Delta c_1 = \begin{pmatrix} \epsilon & \Delta \\ \Delta & -\epsilon \end{pmatrix}$$

$\S$  Se definirmos:  $B_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} b_{\vec{k}\uparrow} \\ b_{-\vec{k}\downarrow}^* \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\uparrow} \\ a_{-\vec{k}\downarrow}^* \end{pmatrix} = S A_{\vec{k}}$

$$A_{\vec{k}} = S^{-1} B_{\vec{k}}$$

onde:  $\hat{S} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & v_{\vec{k}} \\ -v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix}$  com  $u_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\epsilon(\vec{k})}{E(\vec{k})} \right]$

$$\hat{S}^{-1} = \begin{pmatrix} u_{\vec{k}} & -v_{\vec{k}} \\ v_{\vec{k}} & u_{\vec{k}} \end{pmatrix} = \hat{S}^+$$

$$v_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\epsilon(\vec{k})}{E(\vec{k})} \right]$$

$$E(\vec{k}) = \sqrt{\epsilon(\vec{k})^2 + \Delta^2}$$

$$u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1$$

então:

$$\hat{S} \hat{H} \hat{S}^{-1} = \begin{pmatrix} E(\vec{k}) & 0 \\ 0 & -E(\vec{k}) \end{pmatrix} = h$$

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}}^\dagger \hat{H} A_{\vec{k}} + c = \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^\dagger \hat{S} h \hat{S}^{-1} B_{\vec{k}} + c \\ &= \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^\dagger h B_{\vec{k}} + c = \sum_{\vec{k}} E(\vec{k}) [b_{\vec{k}\uparrow}^\dagger b_{\vec{k}\uparrow} - b_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger b_{-\vec{k}\downarrow}] + c \\ H &= \sum_{\vec{k}\sigma} E(\vec{k}) b_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{k}} [\epsilon(\vec{k}) - E(\vec{k})] + \frac{V}{\lambda} \Delta^2 \end{aligned}$$

Note que:

$$\left. \begin{aligned} b_{\vec{k}\uparrow} &= u_{\vec{k}} a_{\vec{k}\uparrow} + v_{\vec{k}} a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \\ b_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger &= -v_{\vec{k}} a_{\vec{k}\uparrow} + u_{\vec{k}} a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \end{aligned} \right\} \text{Transformação de Bogoliubov-fermônica}$$

e que os operadores  $b_{\vec{k}\sigma}^\dagger$  são fermion ~~legítimos~~ legítimos.

$$\{b_{\vec{k}\sigma}, b_{\vec{p}\tau}^\dagger\} = \delta_{\sigma\tau} \delta_{\vec{k},\vec{p}}$$

$b_{\vec{k}\sigma}^\dagger$  era uma "quasi-partícula", na linguagem usual.

O estado fundamental do sistema tem

$$b_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} b_{\vec{k}\sigma} = 0 \quad \forall \vec{k}, \sigma$$

$$\Rightarrow E_0 = \sum_{\vec{k}} [\epsilon(\vec{k}) - E(\vec{k})] + \frac{V}{\lambda} \Delta^2$$

A excitações do sistema correspondem a ocupar os níveis de quasipartículas, que têm energia:

$$E(\vec{k}) = \sqrt{(\epsilon(\vec{k}))^2 + \Delta^2} = \sqrt{\left[\frac{\vec{k}^2}{2m} - \mu\right]^2 + \Delta^2}$$

xar o caso de fermions livres. No caso de haver uma estrutura de bandas, fazemos  $\frac{\vec{k}^2}{2m} \rightarrow E(\vec{k})$ . A menor energia de excitação corresponde a  $\vec{k} = \vec{k}_F$  onde

de excitação corresponde a  $\vec{k} = \vec{k}_F$  onde.

$E(\vec{k}_F) = \Delta > 0 \Rightarrow$  Há um "gap" de excitação entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado.

O gap corresponde a quebra num par de condensado, cuja energia de ligação é  $\Delta$ .

Vamos agora calcular o gap supercondutor.

Sabemos que:

$$A_{\vec{k}} = \langle a_{-\vec{k}\downarrow} a_{\vec{k}\uparrow} \rangle$$

$$\text{Mas: } a_{-\vec{k}\downarrow} = \nu_{\vec{k}} b_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} + u_{\vec{k}} b_{-\vec{k}\downarrow} \text{ e } a_{\vec{k}\uparrow} = u_{\vec{k}} b_{\vec{k}\uparrow} - \nu_{\vec{k}} b_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger}$$

$$\Rightarrow A_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}} \langle b_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} b_{\vec{k}\uparrow} + b_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} b_{-\vec{k}\downarrow} \rangle - u_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}}$$

já que os termos  $\langle b_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} b_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle$  e  $\langle b_{-\vec{k}\downarrow} b_{\vec{k}\uparrow} \rangle$  são nulos.

Assim: (vamos que  $u_{\vec{k}} = u_{\vec{k}}$  e  $\nu_{-\vec{k}} = \nu_{\vec{k}}$ )

$$\Delta = -\frac{\lambda}{V} \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}} = -\frac{\lambda}{V} \sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}} \left[ \underbrace{\sum_{\sigma} \langle b_{\vec{k}\sigma}^+ b_{\vec{k}\sigma} \rangle - 1}_{f(E(\vec{k}))} \right]$$

onde  $f(x) = \frac{1}{e^{\beta x} + 1}$  é a distribuição de Fermi-Dirac.

$$\text{Como } 2f(x) - 1 = -\tanh\left(\frac{\beta x}{2}\right) \text{ e } u_{\vec{k}} \nu_{\vec{k}} = \frac{\Delta}{2E(\vec{k})}$$

$$\Delta = \frac{\lambda}{V} \frac{\Delta}{2} \sum_{\vec{k}} \frac{\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{k})}{2}\right)}{E(\vec{k})}$$

$$\Rightarrow \frac{2}{\lambda} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2} E(\vec{k})\right)}{E(\vec{k})} \delta(\omega_0 - |\epsilon(\vec{k})|)$$

onde reintroduzimos a condição sobre a energia  $\epsilon(\vec{k})$  para que a interação seja atrativa. ~~pois~~ Como o integrando só depende de  $\epsilon(\vec{k})$ :

$$\frac{2}{\lambda} = \int_{-\omega_0}^{\omega_0} \frac{s_0(\epsilon) d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \tanh\left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}\right]$$

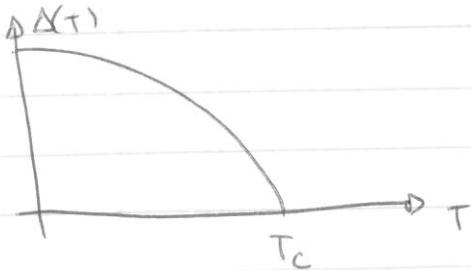
A densidade de estados varia pouco na escala de  $\omega_0$ , portanto podemos tomá-la como constante e igual ao seu valor na superfície de Fermi: ( $s_0 = s(E_F)$ )

$$\frac{1}{s\lambda} = \int_0^{\omega_0} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \tanh\left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2(+)}\right]$$

"Equações do gap supercondutor"

onde explicitamos que  $\Delta$  é função da temperatura

O comportamento do gap é:



Poderemos calculá-lo a  $T=0$ :  $\Delta(0) = \Delta_0$

$$\frac{1}{\beta_0 \lambda} = \int_0^{\omega_0} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta_0^2}} = \sinh^{-1} \left( \frac{\omega_0}{\Delta_0} \right) \Rightarrow \Delta_0 = \frac{\omega_0}{\sinh(\frac{1}{\beta_0 \lambda})}$$

$$\text{Se } \beta_0 \lambda \ll 1 \Rightarrow \boxed{\Delta_0 \approx 2\omega_0 e^{-\frac{1}{\beta_0 \lambda}}}$$

Adé  $T \rightarrow T_c$ ,  $\Delta(T) \rightarrow 0$ . Assim, podemos calcular  $T_c$ :

$$\frac{1}{\beta_0 \lambda} = \int_0^{\omega_0} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh \left( \frac{\beta_0 \epsilon}{2} \right) = \int_0^{\beta_0 \omega_0} \frac{dx}{x} \tanh \left( \frac{x}{2} \right)$$

$$\int \frac{dx}{x} \tanh \left( \frac{x}{2} \right) = \ln x \tanh \left( \frac{x}{2} \right) \Big|_0^{\infty} - \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \frac{dx \ln x}{\cosh^2 \left( \frac{x}{2} \right)}$$

Como veremos, se  $\beta_0 \ll 1$ ,  $\omega_0 \gg T_c \Rightarrow \beta_0 \omega_0 \gg 1$ . Assim:

$$\frac{1}{\beta_0 \lambda} \approx \ln(\beta_0 \omega_0) - \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \frac{dx \ln x}{\cosh^2 \left( \frac{x}{2} \right)} = \ln(\beta_0 \omega_0) - \ln \left( \frac{\pi}{2} \right) + \gamma = \ln \left( \frac{2e^\gamma \omega_0}{\pi T_c} \right)$$

onde  $\gamma = 0.577$  = Constante de Euler

$$\Rightarrow \boxed{T_c \approx \left( \frac{2e^\gamma}{\pi} \right) \omega_0 e^{-\frac{1}{\beta_0 \lambda}} = \frac{e^\gamma}{\pi} \Delta(0) = 0.57 \Delta_0}$$

## Cálculo do calor específico

Como vimos, o estado BCS é caracterizado pela ocupação térmica dos níveis de energia dados por:

$$E(\vec{k}) = \left[ \left( \frac{\hbar^2}{2m} - \mu \right)^2 + \Delta^2(T) \right]^{1/2}$$

Segundo a distribuição de Fermi-Dirac, o "gap" supercondutor é uma função da temperatura  $T$  dada implicitamente por:

$$\frac{1}{S_0 \lambda} = \int_0^{\infty} \frac{dE}{\sqrt{E^2 + \Delta^2(T)}} \tanh \left[ \frac{\sqrt{E^2 + \Delta^2(T)}}{2T} \right].$$

A distribuição de Fermi-Dirac nos dá a ocupação média do nível  $\vec{k}$ :

$$\langle n_{\vec{k}} \rangle = \langle b_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}\sigma} \rangle = f(E(\vec{k})) = \frac{1}{e^{\beta E_{\vec{k}}} + 1}$$

Como cada nível  $\vec{k}$  (com projeção de spin  $\sigma$ ) pode ter ocupação 0 ou 1, segue que:

$$\langle n_{\vec{k}} \rangle = 1 \times P_{\vec{k}}^1 + 0 \times P_{\vec{k}}^0 = P_{\vec{k}}^1$$

Onde  $P_{\vec{k}}^1$  é a probabilidade do nível estar ocupado e  $P_{\vec{k}}^0$  é a probabilidade deles estar vazios. Obviamente

$$P_{\vec{k}}^1 + P_{\vec{k}}^0 = 1$$

Assim:

$$P_{\vec{k}}^1 = f(E(\vec{k})) \quad \& \quad P_{\vec{k}}^0 = 1 - f(E(\vec{k})) = 1 - P_{\vec{k}}^1$$

A entropia total do sistema é dada por

$$S(T) = -k_B \sum_i p_i \ln p_i$$

Onde  $p_i$  é a probabilidade do sistema estar no estado  $i$ . Portanto, no estado BCS (fazendo  $k_B=1$ , como de tradição) :

$$S(T) = -2 \sum_{\vec{k}} \left[ f_{\vec{k}}^0 \ln f_{\vec{k}}^0 + f_{\vec{k}}^1 \ln f_{\vec{k}}^1 \right]$$

Onde o fator de 2 vem da degenerescência de spin.  
Logo:  $[f(E_{\vec{k}}) \equiv f_{\vec{k}}]$

$$S(T) = -2 \sum_{\vec{k}} \left[ f_{\vec{k}} \ln f_{\vec{k}} + (1-f_{\vec{k}}) \ln (1-f_{\vec{k}}) \right]$$

O calor específico a volume constante pode ser obtido de:

$$C_v(T) = T \frac{\partial S}{\partial T} \Big|_{V,\mu} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta} \Big|_{V,\mu}$$

Mas cuidado. A derivada em relação a  $T$  (ou a  $\beta$ ) tem contribuição explícita, pois  $f(E_{\vec{k}})$  depende explicitamente de  $\beta$ , e implícita, pois  $\Delta$  depende da temperatura. Portanto

$$C_v(T) = 2\beta \sum_{\vec{k}} \left[ \ln f_{\vec{k}} + 1 - \ln(1-f_{\vec{k}}) - 1 \right] \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial \beta}$$

$$C_v(T) = 2\beta \sum_{\vec{k}} \ln \left( \frac{f_{\vec{k}}}{1-f_{\vec{k}}} \right) \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x=\beta E_{\vec{k}}} \frac{\partial(\beta E_{\vec{k}})}{\partial \beta}$$

Onde  $\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{e^x+1} \right] = -\frac{e^x}{(e^x+1)^2}$

Além disso:

$$1 - f_{\text{ex}} = 1 - \frac{1}{e^{\beta E_{\text{R}}} + 1} = \frac{e^{-\beta E_{\text{R}}}}{e^{\beta E_{\text{R}}} + 1}$$

$$\frac{f_{\text{ex}}}{1 - f_{\text{ex}}} = e^{-\beta E_{\text{R}}} \Rightarrow \ln\left(\frac{f_{\text{ex}}}{1 - f_{\text{ex}}}\right) = -\beta E_{\text{R}}$$

$$\frac{\partial(\beta E_{\text{R}})}{\partial \beta} = E_{\text{R}} + \beta \frac{\partial E_{\text{R}}}{\partial \beta} = E_{\text{R}} + \frac{\beta}{E_{\text{R}}} \Delta \frac{\partial \Delta}{\partial \beta}$$

Juntando tudo:

$$C_V(T) = +2\beta^2 \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \left[ \frac{+e^{\beta E_{\vec{k}}}}{(e^{\beta E_{\vec{k}}} + 1)^2} \right] \left[ E_{\vec{k}} + \frac{\Delta}{E_{\vec{k}}} \frac{\beta \partial \Delta}{\partial \beta} \right]$$

~~Fazendo agora~~  $\sum_{\vec{k}} = V \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} = \int g_0(\epsilon) d\epsilon$ , obtemos o calor específico:

$$C_V(T) = 2\beta^2 \int g_0(\epsilon) d\epsilon E(\epsilon) \left[ \frac{e^{\beta E(\epsilon)}}{(e^{\beta E(\epsilon)} + 1)^2} \right] \left[ E(\epsilon) + \frac{\Delta}{E(\epsilon)} \frac{\beta \partial \Delta}{\partial \beta} \right]$$

Onde  $E(\epsilon) = \sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2(T)}$ . Essa expressão tem que ser calculada numericamente. Entretanto, quando  $T \rightarrow T_c$ , o 1º termo tende a:

$$C_V^{(1)}(T) \approx 2\beta_c^2 g_0 \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \epsilon^2 \frac{e^{\beta \epsilon}}{(e^{\beta \epsilon} + 1)^2} = 2g_0 T_c \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x^2}{(e^x + 1)(e^{-x} + 1)}$$

De Ashcroft e Mermin (Apêndice C) a integral é  $\pi^2/3$ .

$$C_V^{(1)}(T_c) \approx \frac{2\pi^2}{3} g_0 T_c$$

que é a vala obtida para o gás ideal de fôrniões em Ense, portanto, corresponde ao calor específico no

estado normal. O segundo termo, entretanto, é descontínuo em  $T_c$ , pois  $\Delta = 0$  se  $T > T_c$  e

$$\begin{aligned}\Delta C_V^{(2)}(T_c) &\approx 2\beta_c^2 \Delta g_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{\beta_c E}}{(e^{\beta_c E} + 1)^2} \left. \frac{\partial \Delta}{\partial \beta_c} \right|_{\beta_c = \beta_c} \\ &= -2\beta_c g_0 \Delta \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{\beta_c E}}{(e^{\beta_c E} + 1)^2} \left. \frac{\partial \Delta}{\partial T} \right|_{T=T_c} \\ &= -g_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} \left. \frac{\partial \Delta^2}{\partial T} \right|_{T=T_c}\end{aligned}$$

A integral acima é:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} = \left. \frac{(-1)}{e^x + 1} \right|_{-\infty}^{\infty} = 0 - (-1) = 1$$

$$\Delta C_V^{(2)}(T_c) = -g_0 \left. \frac{\partial \Delta^2}{\partial T} \right|_{T=T_c}$$

Assim, precisamos de comportamento do "gap" quando  $T \rightarrow T_c$ . Pode-se mostrar que:

$$\Delta^2(T) \approx T_c^2 \frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right)$$

(ver Landau, "Statistical Physics", part 2, § Sec. 40)  
onde  $\zeta(x)$  é a função zeta de Riemann. Logo:

$$-\left. \frac{\partial \Delta^2}{\partial T} \right|_{T=T_c} = \frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} T_c$$

$$\Rightarrow \Delta C_V^{(2)}(T_c) = \frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} g_0 T_c$$

Finalmente, a previsão BCS para a razão entre o salto do calor específico e o seu valor no estado normal em  $T_c$  é:

$$\frac{\Delta C_v(T_c)}{C_v(T_c)} = \frac{\Delta C_v^{(2)}(T_c)}{C_v^{(1)}(T_c)} = \frac{8\pi^2}{75(3)} \frac{3}{2\pi^2} = \frac{12}{75(3)} \approx 1.43.$$

Esse valor é bem próximo dos valores observados nos supercondutores clássicos.

## Efeito Meissner

O efeito Meissner foi explicado fonoemologicamente pelos irmãos London (F. e H. London) em 1935, que notaram que, se assumíssemos:

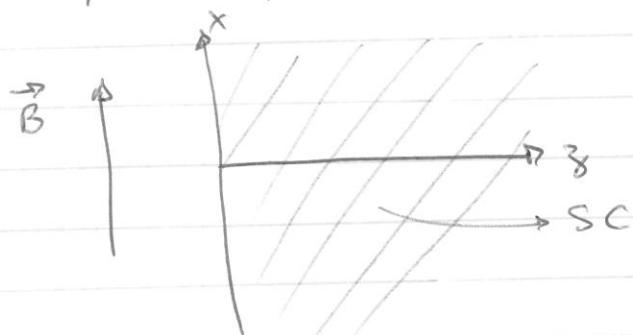
$$\nabla \times \vec{j} = -\Gamma \vec{B}$$

Então, da equação de Ampère - Maxwell estática:

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c} \vec{j} \Rightarrow \vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \frac{4\pi}{c} \vec{\nabla} \times \vec{j} = -\frac{4\pi\Gamma}{c} \vec{B}$$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{\nabla}^2 \vec{B} = \frac{4\pi\Gamma}{c} \vec{B}} \quad (\text{usando } \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0)$$

Se supusermos um semi-espaco V infinito em  $z > 0$  com um campo  $\vec{B}$  aplicado (uniforme) para  $z < 0$ :



então, como a variação se dá, por simetria, apenas com

$$\frac{\partial^2 B_x}{\partial z^2} = \frac{4\pi\Gamma}{c} B_x \Rightarrow B_x = B_0 e^{-\frac{|z|}{\lambda}} \quad z > 0$$

onde  $\lambda^2 = \frac{c}{4\pi\Gamma} \Rightarrow \lambda = \text{comprimento de penetração}$   
no SC

Assim,  $\vec{B}$  decai exponencialmente dentro do SC e não é nulo numa (final) camada de espessura  $\lambda$ .

A equação de London pode ser obtida, no gauge  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ , através de:

$$\vec{j} = -\Gamma \vec{A}$$

"Equação de London"

Assim, podemos obter o efeito Meissner a partir da Equação de London. No espaço de Fourier temos:

$$\vec{j}(\vec{k}) = -\Gamma \vec{A}(\vec{k}) \quad \text{onde} \quad \vec{k} \cdot \vec{A}(\vec{k}) = 0$$

A relação acima é válida quando  $\vec{k} \rightarrow 0$ ; quando  $k \gg \frac{T_c}{\sqrt{F}}$  ela tem que ser modificada. Vamos simplificar a discussão assumindo  $\vec{k} = \vec{0}$  e calcular a corrente no SC com a aplicação de um vetor  $\vec{A}(\vec{0})$

A introdução de  $\vec{A}$  é feita através do acoplamento mínimo: ( $e > 0$ )

$$\vec{i} \xrightarrow{i} \vec{i} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{0}) \xrightarrow{\vec{k} + \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{0})}$$

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\vec{k}^2}{2m} - \mu \rightarrow \epsilon(\vec{k}) + \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{k} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2$$

$$\vec{j} = -\frac{e}{mc} \vec{i} \rightarrow -\frac{e}{mc} \left( \vec{i} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \rightarrow -\frac{e}{mc} \vec{k} - \frac{e^2}{mc} \vec{A}$$

Na notação de Nambu:

$$\epsilon(\vec{k}) \gamma_3 \rightarrow \epsilon(\vec{k}) \gamma_3 + \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{k} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 \gamma_3$$

$$\vec{j} \rightarrow -\frac{e}{mc} \vec{k} - \frac{e^2}{mc} \vec{A} \gamma_3$$

já que  $\vec{k}$  é ímpar sob a inversão ( $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$ ). Assim

$$H \rightarrow H = \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}}^+ \left[ e(\vec{k}) c_3 + \frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{k} + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 c_3 + \Delta c_1 \right] A_{\vec{k}} + \frac{V}{\lambda} \vec{A}^2 \cancel{\vec{c}_1}$$

$$\begin{aligned} V \langle j_i \rangle &= \sum_{\vec{k}} \left\langle A_{\vec{k}}^+ \left( -\frac{e}{m} k_i - \frac{e^2}{mc} A_i c_3 \right) A_{\vec{k}} \right\rangle \\ &= -\frac{e}{m} \sum_{\vec{k}} k_i \langle A_{\vec{k}}^+ A_{\vec{k}} \rangle - \frac{e^2}{mc} A_i \sum_{\vec{k}} \langle A_{\vec{k}}^+ c_3 A_{\vec{k}} \rangle \end{aligned}$$

~~Vamos~~ Vamos calcular  $\langle j_i \rangle$  em primeira ordem em  $\vec{A}$ . O segundo termo já é de primeira ordem em  $\vec{A}$ . Portanto, o valor me dirá

$$\langle A_{\vec{k}}^+ c_3 A_{\vec{k}} \rangle$$

pode ser calculado no sistema não perturbado por  $\vec{A}$ .  
Já o 1º termo tem que ser calculado em resposta linear a  $\vec{A}$ .  
Para isso, podemos desprezar o termo em  $\vec{A}^2$  no Hamiltoniano.  
Portanto, a perturbação é:

$$H_{\text{ext}} = \frac{e}{mc} \sum_{\vec{k}} A_j k_j A_{\vec{k}}^+ A_{\vec{k}}$$

E queremos:

$$\langle j_i \rangle = -\frac{e}{mcV} \sum_{\vec{k}} k_i \langle A_{\vec{k}}^+ A_{\vec{k}} \rangle$$

E fácil ver que  $\sum_{\vec{k}} \langle A_{\vec{k}}^+ c_3 A_{\vec{k}} \rangle = \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}0}^+ a_{\vec{k}0} = N = \text{número total de elétrons}$

$$\Rightarrow \langle j_i \rangle = -\frac{e^2}{mcV} \sum_{\vec{k}} \langle A_{\vec{k}}^+ c_3 A_{\vec{k}} \rangle = -\frac{N e^2}{mcV} A_{ii}$$

Note que a perturbação é proporcional à matriz unidade no espaço de Nambu. Logo, ela não altera a diagonalização de  $H$ :

$$H = \sum_{\vec{k}} B_{\vec{k}}^+ \left[ \cancel{h} + SE \frac{1}{m} \right] B_{\vec{k}} \quad SE = \frac{e}{mc} A_j k_j$$

$$= \sum_{\vec{k}} \left\{ E(\vec{k}) + \delta E(\vec{k}) \right\} b_{\vec{k}\sigma}^+ b_{\vec{k}\sigma}$$

Assim:

$$\nabla \langle j_i^p \rangle = - \frac{e}{mc} \sum_{\vec{k}} k_i \langle A_{\vec{k}}^+ A_{\vec{k}} \rangle = - \frac{e}{mc} \sum_{\vec{k}} k_i \langle B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} \rangle$$

$$= - \frac{e}{mc} \sum_{\vec{k}\sigma} k_i \langle b_{\vec{k}\sigma}^+ b_{\vec{k}\sigma} \rangle = - \frac{e}{mc} \sum_{\vec{k}\sigma} k_i f(E(\vec{k}) + \delta E(\vec{k}))$$

Expandido em  $\delta E(\vec{k}) \propto O(\vec{A})$

$$\nabla \langle j_i^p \rangle = \underbrace{\nabla \langle j_i^p \rangle}_{O(0)} (\vec{A} = \vec{0}) - \frac{e}{mc} \sum_{\vec{k}\sigma} k_i \delta E(\vec{k}) f'(E(\vec{k}))$$

$$= - \frac{e^2}{mc} A_j \sum_{\vec{k}\sigma} k_i k_j f'(E(\vec{k}))$$

~~$\nabla$~~  Assim:  $\langle j_i \rangle = \langle j_i^p \rangle + \langle j_i^d \rangle = - \frac{Ne^2}{mcV} \left[ S_{ij} + \frac{1}{Nm} \sum_{\vec{k}\sigma} k_i k_j f'(E) \right]$

Por simetria,  $\sum_{\vec{k}\sigma} k_i k_j f'(E) = S_{ij} \sum_{\vec{k}\sigma} k_i^2 f'(E) = \frac{S_{ij}}{3} \sum_{\vec{k}\sigma} k^2 f'(E) =$

$$= \frac{2}{3} S_{ij} \sum_{\vec{k}} k^2 f'(E) = \frac{4\pi m V}{3} S_{ij} \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \left( \frac{k^2}{2m} \right) f'(E(\vec{k})) = (*)$$

A integral acima não depende de valores próximos a  $k_F$ . Assim:

$$(*) = \frac{4}{3} m V S_{ij} E_F \int dk f'(E(\vec{k})) . \text{ Mas } E_F S_{ij} = \frac{k_F^2}{2m} \frac{mk_F}{2\pi^2} = \frac{k_F^3}{4\pi^2} = \frac{3}{4} \frac{1}{1}$$

Logo:

$$\langle \vec{j} \rangle = -\frac{N_s e^2}{mcV} \vec{A}; N_s(T) = N \left[ 1 + \frac{4}{3} m V \times \frac{3}{4} \frac{N}{V} \times \frac{1}{Nm} \int dE f'(E(\epsilon)) \right]$$

$N_s(T) = N \left[ 1 + \int dE f'(E) \right]$

$$\lambda^2 = \frac{4\pi\Gamma}{c} = + \frac{4\pi N_s(T) e^2}{mc^2 V} = \frac{4\pi N_s(T) e^2}{mc^2}$$

Quando  $T \rightarrow 0$ :  $f'(x) \rightarrow -\delta(x)$  e  $\int dE \delta[\sqrt{e^2 + \Delta^2}] = 0$

$$\Rightarrow N_s(T) \rightarrow n = \frac{N}{V} \text{ e } \lambda^2 \rightarrow \frac{\omega_p^2}{c^2} \Rightarrow \boxed{\lambda(T=0) = \frac{c}{\omega_p}}$$

Quando  $T \rightarrow T_c$ ;  $\Delta \rightarrow 0$  e  $\int dE f'(E) \rightarrow \int dE f'(\epsilon) = f(\epsilon) \Big|_{-\infty}^{\infty} = -1$

e  $N_s(T) \rightarrow 0$   $\lambda(T \rightarrow T_c) \rightarrow \infty \Rightarrow$  não há mais efeito Meissner

