(2) ~~Hałasik~~

<u>Efekt izotopowy</u> – $T_c \sim M^{-\alpha}$, $\alpha = \frac{1}{2}$

temp. krytyczna; masa jonów w sieci kryst.

$\omega_D \sim M^{-\alpha}$, $\alpha = \frac{1}{2}$

częstość Debye'a

Sugeruje on istotność oddziaływań elektron-fonon w mechanizmie nadprzewodnictwa.

(1) Hamiltonian Fröhlicha

Wyprowadzić człon opisujący oddziaływania elektronów i fotonów w metalu.

Rozwiązanie:

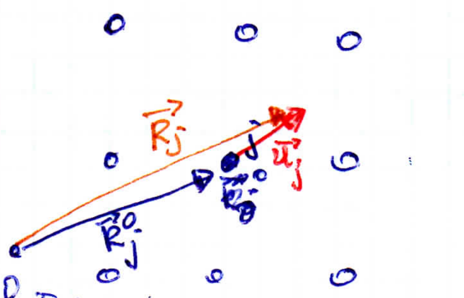
Zaczniemy od wypisania wyrażenia na potencjał kulombowski pomiędzy elektronami oraz jonami:

$$V_{el-ion} = \int d\vec{r}\,(-e)\,\rho_{el}(\vec{r}) \sum_{j=1}^{N} V_{ion}(\vec{r}-\vec{R}_j)$$

gęstość elektronowa; potencjał kulombowski

$$\vec{R}_j = \vec{R}_j^{0} + \vec{u}_j$$

położenie równowagi; wychylenie z poł. równowagi



Potencjał rozwijamy w pobliżu położenia równowagi:

$$V_{ion}(\vec{r}-\vec{R}_j) \approx V_{ion}(\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)}) - \vec{\nabla}_{\vec{r}} V_{ion}(\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)}) \cdot \vec{u}_j \,,$$

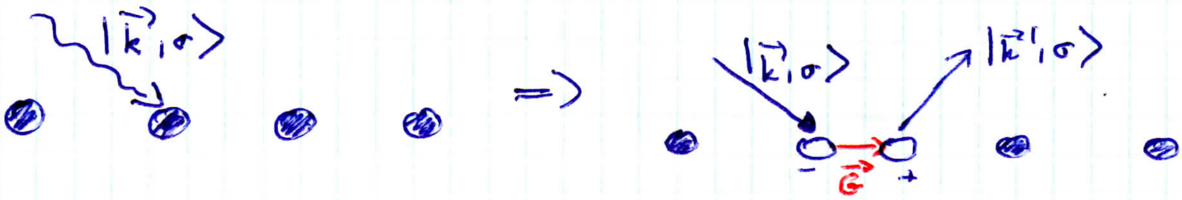
tu mamy oddz. el.-fonon.

czyli

$$V_{el-ion} = \int d^3\vec{r}\,(-e)\,\rho_{el}(\vec{r}) \sum_{j=1}^{N} V_{ion}(\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)}) - \int d^3\vec{r}\,(-e)\,\rho_{el}(\vec{r}) \sum_{j=1}^{N} \vec{\nabla}_{\vec{r}} V_{ion}(\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)}) \cdot \vec{u}_j$$

Czyli dalej zajmujemy się wyrażeniem:

$$V_{el-ph} = \int d^3\vec{r}\, \rho_{el}(\vec{r}) \left\{ \sum_j e\vec{u}_j \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} V_{ion}\left(\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)}\right) \right\}$$



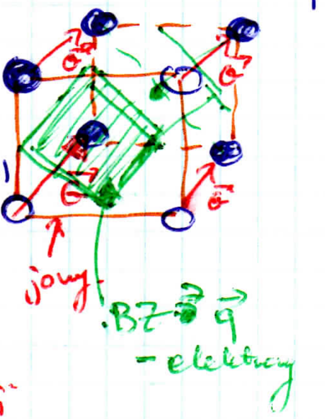
Wykonujemy transformację Fouriera i przechodzimy do przestrzeni pędów:

I strefa Brillouina

$$V_{ion}(\vec{r}) = \underset{\uparrow \text{obj.}}{\frac{1}{\Omega}} \sum_{\vec{p}} V_{\vec{p}}\, e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \; ; \quad \vec{p} = \vec{q}+\vec{G}, \; \vec{q}\in BZ, \; \vec{G}\in RL$$

wektory sieci odwrotnej

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}} V_{ion}\left(\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)}\right) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\substack{\vec{q}\in BZ \\ \vec{G}\in RL}}' i\left(\vec{q}+\vec{G}\right) V_{\vec{q}+\vec{G}}\, e^{i(\vec{q}+\vec{G})\cdot(\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)})}$$



$$\vec{u}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}\in BZ} \sum_{\lambda} \frac{l_{\vec{k},\lambda}}{\sqrt{2}} \left(b_{\vec{k},\lambda} + b^{+}_{-\vec{k},\lambda}\right) \vec{\epsilon}_{\vec{k},\lambda}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_j^{(0)}}$$

λ — polaryzacja

operator położenia w II kwantyzacji

ponieważ: $\sum_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_j} = N\delta_{\vec{k},0}$, czyli

$$\sum_j e\,\vec{u}_j \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} V_{ion}\left(\vec{r}-\vec{R}_j^{(0)}\right) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\substack{\vec{q}\in BZ \\ \vec{G}\in RL \\ \lambda}} g_{\vec{q},\vec{G},\lambda} \left(b_{\vec{q},\lambda} + b^{+}_{-\vec{q},\lambda}\right) e^{i(\vec{q}+\vec{G})\cdot\vec{r}},$$

gdzie stała sprzężenia dla fononów wynosi:

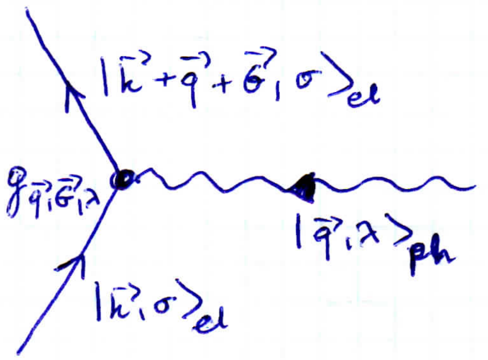
$$g_{\vec{q},\vec{G},\lambda} = ie\sqrt{\frac{N\hbar}{2M\omega_{\vec{q},\lambda}}} \left(\vec{q}+\vec{G}\right)\cdot \varepsilon_{\vec{q},\lambda} V_{\vec{q}+\vec{G}}$$

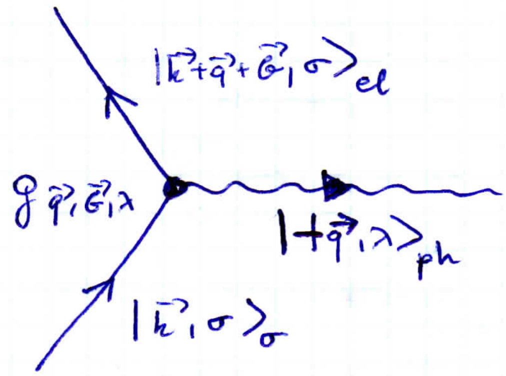
Operator gęstości elektronowej w reprezentacji Fouriera:

$$\rho_{el}(\vec r) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec k \vec q \sigma} e^{-i\vec p\cdot\vec r}\, c^+_{\vec k+\vec p,\sigma}\, c_{\vec k\sigma} \quad ,$$

ponieważ $\int d^3_{\vec r}\; e^{i\vec k\cdot\vec r} = \Omega\,\delta(\vec k)$, czyli

$$V_{el\text{-}ph} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec k,\sigma} \sum_{\vec q,\lambda} \sum_{\vec G} g_{\vec q,\vec G,\lambda}\; c^+_{\vec k+\vec q+\vec G,\sigma}\, c_{\vec k\sigma} \left(b_{\vec q,\lambda} + b^+_{-\vec q,\lambda} \right)$$





$\vec\varepsilon_{\vec q,\lambda}$ – jest równoległy lub prostopadły, więc $\vec q\cdot\vec\varepsilon_{\vec q,\lambda}$ w $g_{\vec q,\vec G=0,\lambda}$ jest niezerowy tylko dla podłużnej polaryzacji fononów.

W najprostszym przypadku izotropowym w którym mamy do czynienia tylko z fononami akustycznymi, jony mające ładunek $+Ze$,

$$V_{\vec q} = \frac{Ze}{\varepsilon_0}\,\frac{1}{\vec q + \kappa^2} \quad , \text{ wtedy}$$

$$V_{el\text{-}ph} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec k,\sigma} \sum_{\vec q} g_{\vec q}\; c^+_{\vec k+\vec q\sigma}\, c_{\vec k\sigma} \left(b_{\vec q} + b^+_{-\vec q} \right) ,$$

gdzie $$g_{\vec q} = i\,\frac{Ze^2}{\varepsilon_0}\,\frac{q}{q^2+\kappa^2}\sqrt{\frac{N\hbar}{2M\omega_{\vec q}}}$$

Hamiltonian Fröhlicha:

$$\hat{H}_{Fr} = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}}\, c^{+}_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q}} \left(b^{+}_{\vec{q}} b_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\vec{q}} g_{\vec{q}}\, c^{+}_{\vec{k}+\vec{q}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} \left(b_{\vec{q}} + b^{+}_{-\vec{q}} \right)$$

Hamiltonian ten jest punktem wyjścia do uzyskania efektywnego hamiltonianu BCS.

2 Transformacja Wolffa - Schieffera

Wychodząc z hamiltonianu:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

, gdzie $\hat{H}_0$ - część swobodna (elektrony + fonony)

$\hat{H}_1$ - zaburzenie (oddziaływanie el.-fon.)

Definiujemy transformację kanoniczną hamiltonianu przy pomocy wyrażenia:

$$\hat{H}' = e^{-\hat{S}} \hat{H} e^{\hat{S}} = \left(1 - \hat{S} + \frac{1}{2!}\hat{S}^2 - \dots\right) \hat{H} \left(1 + \hat{S} + \frac{1}{2!}\hat{S}^2 + \dots\right) =$$

Baker-Campbell-Hausdorff

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

$$\underset{\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1}{=} \hat{H}_0 + \left(\hat{H}_1 + [\hat{H}_0, \hat{S}]\right) + \frac{1}{2}\left[\left(\hat{H}_1 + [\hat{H}_0, \hat{S}]\right), \hat{S}\right] + \frac{1}{2}[\hat{H}_1, \hat{S}] + \dots$$

przy czym $\hat{S}$ jest antyhermitowskim operatorem ($\hat{S}^{+} = -\hat{S}$) będącym generatorem transformacji. Celem tej transformacji jest dostanie efektywnego oddziaływania pomiędzy elektronami w tym celu chcemy pozbyć się H_1 w pierwszym rzędzie.

Możemy to uzyskać korzystając z równania:

$$\hat{H}_1 + [\hat{H}_0, \hat{S}] = 0 \quad , \text{ wtedy}$$

w naszym przypadku:

$$S = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k}\vec{q}} W_{\vec{k}\vec{q}}\, c^{+}_{\vec{k}\sigma}\, c_{\vec{k}-\vec{q}\sigma}\left(\alpha\, b_q + \beta\, b^{+}_{-\vec{q}}\right),$$

gdzie
$$\alpha = -\left(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}\right)^{-1}$$
$$\beta = -\left(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar\omega_{\vec{q}}\right)^{-1} \qquad \omega_q = \omega_{-q}$$

$W_{\vec{k},\vec{q}} \leftarrow$ ~~podwójna~~ odd. elektron-jon

co sprawia, że równanie redukuje się do postaci:

$$\hat{H}' = \hat{H}_0 + \frac{1}{2}[\hat{H}_1, \hat{S}] \quad , \text{ czyli w naszym}$$

przypadku. $\left\{\alpha' = \alpha_{\vec{k}',\vec{q}'} \,,\ \beta = \beta_{\vec{k}'\vec{q}'}\right.$

$$[\hat{H}_1, \hat{S}] = \frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{k},\vec{k}'\vec{q}\\ \sigma\sigma'}} W_{\vec{k}\vec{q}} W_{\vec{k}-\vec{q}} \left(\beta'^{*} - \alpha'^{*}\right)\Big|_{\vec{q}'=-\vec{q}}\, C^{+}_{\vec{k}\sigma}\, C_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}\, C^{+}_{\vec{k}'\sigma}\, C_{\vec{k}'+\vec{q},\sigma}$$

$$+ \sum_{\vec{k}\vec{q}\sigma} W_{\vec{k}\vec{q}}\, W_{\vec{k}-\vec{q},\vec{q}}\left(\hat{n}_{k\sigma} - \hat{n}_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}\right)\left(\alpha_{\vec{k}-\vec{q},-\vec{q}}\, b_{-\vec{q}} + \beta_{\vec{k}-\vec{q},-\vec{q}}\, b^{+}_{\vec{q}}\right)\cdot$$
$$\cdot\left(b_{\vec{q}} + b^{+}_{-q}\right) \quad , \text{ gdzie } n_{\vec{k},\sigma} = C^{+}_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}\sigma},$$

$\vec{k}-\vec{q},-\vec{q}$

więc

$$\hat{H}' = \hat{H}_{el} + \hat{H}_{ph} + \frac{1}{2}[\hat{H}_1, \hat{S}]$$

Ponieważ interesuje nas tylko zachowanie elektronów, więc

$$\hat{H}_{eff} = \sum_{\vec{k}\sigma} \tilde{\varepsilon}_k\, C^{+}_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\substack{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}\\ \sigma\sigma'}} U_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}}\, C^{+}_{k\sigma}\, C^{+}_{k'\sigma'}\, C_{k'+q,\sigma'}\, C_{k-q\sigma}$$

gdzie

$$\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_{\vec{k}} + \sum_{kq\sigma} W_{kq} W_{k-q,-q} \frac{\hbar\omega_q}{(\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k)^2 + (\hbar\omega_q)^2}$$

$$U_{kk'q} = \frac{W_{kq} W_{k',-q} \hbar\omega_q}{(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k'+q})^2 - (\hbar\omega_q)^2}$$

Ograniczając się do przypadku $\vec{k}' = -\vec{k}$ (parowanie Coopera) dostajemy hamiltonian BCS:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\vec{k}\sigma} \tilde{\varepsilon}_k c^+_{k\sigma} c_{k\sigma} + \sum_{\substack{kk' \\ \sigma\sigma'}} U_{kk'} c^+_{k'\sigma} c^+_{-k\sigma'} c_{-k'\sigma'} c_{k'\sigma}$$

$$U_{kk'} = \frac{|W_{k,k-k'}|^2 \hbar\omega_{k-k'}}{(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})^2 - (\hbar\omega_{k-k'})^2}$$

oddziaływanie między elektronami jest przyciągające ~~gdy~~ $U_{kk'} < 0$, gdy $|\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}| < \hbar\omega_{k-k'}$, wtedy w uproszczeniu możemy przyjąć, że

$$U_{kk'} = \begin{cases} -\frac{g}{\Omega}, & \varepsilon_F - \hbar\omega_D \leq \varepsilon_k, \varepsilon_{k'} \leq \varepsilon_F + \hbar\omega_D \\ 0, & \text{w.p.p.} \end{cases}$$

~~ciągłe~~

3 Przybliżenie średniego pola – hamiltonian Bogoliubova–de Gennesa

Fluktuacje:

$$\left(A-\langle A\rangle\right)\left(B-\langle B\rangle\right) = AB - A\langle B\rangle - B\langle A\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle \approx 0$$

W teorii średniego pola (przybliżeniu Hartree-Focka, przybliżeniu Stonera) pomijamy fluktuacje. } fluktuacje mogą być pominięte

cyli $AB \approx A\langle B\rangle + B\langle A\rangle - \underbrace{\langle A\rangle\langle B\rangle}_{\text{stała}}$

Dla teorii BCS mamy:

$$A = b_k^+ = c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \qquad B = b_k = c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow},$$

cyli

$$c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \, c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \simeq c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}\rangle +$$

$$+ c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+\rangle +$$

$$- \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}\rangle\langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+\rangle$$

~~Wprowadzamy oznaczenie~~

cyli

$k \geq \varepsilon_F - \hbar\omega_D$

$k' \leq \varepsilon_F + \hbar\omega_D$

$$\hat{H}-\mu\hat{N} = \sum_{k\sigma} \underbrace{(\varepsilon_{\vec{k}}-\mu)}_{\xi_{\vec{k}}} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} - \frac{g}{\Omega}\sum_{\vec{k}\vec{k}'}{}' \Big(\langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+\rangle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} +$$

$$+ \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}\rangle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+ - \langle c_{k\uparrow}^+ c_{-k\downarrow}^+\rangle\langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}\rangle \Big)$$

Wprowadzamy oznaczenie:

$$\Delta = \frac{g}{\Omega}\sum_{\vec{k}}{}' \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}\rangle$$

$$\hat{H} - \mu\hat{N} = \sum_{k\sigma} \xi_k c^{+}_{k\sigma} c_{k\sigma} - \sum_{k} \left(\Delta^{*} c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} + \Delta c^{+}_{k\uparrow} c^{+}_{-k\downarrow} \right) + \frac{\Omega |\Delta|^2}{g}$$

Hamiltonian Bogoliubowa-de Gennesa

Wykorzystamy reprezentację spinorów Nambu:

$$\Psi^{+}_{k} = \left(c^{+}_{k\uparrow} , c_{-k\downarrow} \right) , \quad \Psi_k = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c^{+}_{-k\downarrow} \end{pmatrix}$$

wtedy

$$\hat{H} - \mu\hat{N} = \sum_k \Psi^{+}_{k} \begin{pmatrix} \xi_k & -\Delta \\ -\Delta^{*} & -\xi_k \end{pmatrix} \Psi_k + \sum_k \xi_k + \frac{\Omega |\Delta|^2}{g}.$$