# Supercondutividade

Leandro Alexandre

Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Instituto de Física
Mecânica Quântica II

27 de fevereiro de 2008

# Breve Histórico da Supercondutividade (SC)

- 1911: Onnes descobre a supercondutividade

# Breve Histórico da Supercondutividade (SC)

- 1911: Onnes descobre a supercondutividade
- 1933: Efeito Meissner $\rightarrow$ fluxo magnético excluído do interior do SC, a menos de uma pequena região de penetração próxima a sua superfície.

# Breve Histórico da Supercondutividade (SC)

- 1911: Onnes descobre a supercondutividade
- 1933: Efeito Meissner $\longrightarrow$ fluxo magnético excluído do interior do SC, a menos de uma pequena região de penetração próxima a sua superfície.
- 1934: Modelo de Gorter-Casimir $\longrightarrow$ ansatz para a energia livre de um SC (modelo fenomenológico - abordagem termodinâmica)

# Breve Histórico da Supercondutividade (SC)

- 1911: Onnes descobre a supercondutividade
- 1933: Efeito Meissner $\rightarrow$ fluxo magnético excluído do interior do SC, a menos de uma pequena região de penetração próxima a sua superfície.
- 1934: Modelo de Gorter-Casimir $\rightarrow$ ansatz para a energia livre de um SC (modelo fenomenológico - abordagem termodinâmica)
- 1935: Modelo dos irmãos London (modelo fenomenológico - abordagem eletromagnética)

# Breve Histórico da Supercondutividade (SC)

- 1911: Onnes descobre a supercondutividade
- 1933: Efeito Meissner $\longrightarrow$ fluxo magnético excluído do interior do SC, a menos de uma pequena região de penetração próxima a sua superfície.
- 1934: Modelo de Gorter-Casimir $\longrightarrow$ ansatz para a energia livre de um SC (modelo fenomenológico - abordagem termodinâmica)
- 1935: Modelo dos irmãos London (modelo fenomenológico - abordagem eletromagnética)
- 1950: Teoria de Gizburg-Landau $\longrightarrow$ função de onda complexa como parâmetro de ordem

# Breve Histórico da Supercondutividade (SC)

- 1911: Onnes descobre a supercondutividade
- 1933: Efeito Meissner $\longrightarrow$ fluxo magnético excluído do interior do SC, a menos de uma pequena região de penetração próxima a sua superfície.
- 1934: Modelo de Gorter-Casimir $\longrightarrow$ ansatz para a energia livre de um SC (modelo fenomenológico - abordagem termodinâmica)
- 1935: Modelo dos irmãos London (modelo fenomenológico - abordagem eletromagnética)
- 1950: Teoria de Gizburg-Landau $\longrightarrow$ função de onda complexa como parâmetro de ordem
- 1957: Teoria BCS $\longrightarrow$ formação de estado ligado elétron-elétron (teoria padrão da supercondutividade)

  $\boxed{\text{BCS} \longrightarrow \text{Bardeen-Cooper-Schrieffer}}$

# Fatos Experimentais: Resistividade

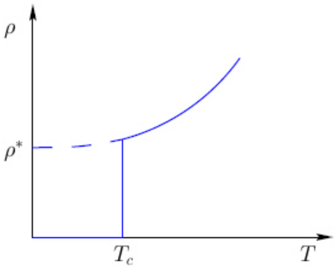



Figure 1: Schematic representation of the resistivity of a metal with a transition to a superconducting phase at $T_c$.

$$\rho(T) \sim T^2, \quad \text{para férmions normais}$$

# Fatos Experimentais: Calor Específico

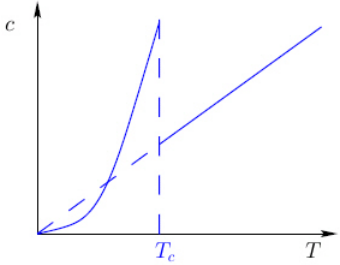
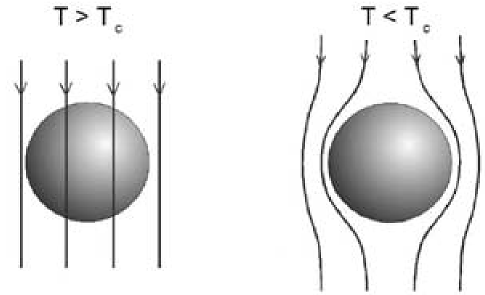



Figure 2: Schematic representation of the specific heat of a metal with a transition to a superconducting phase at $T_c$.

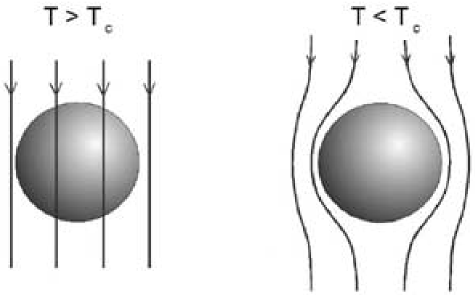
$$C_{V_n} \sim T$$

$$C_{V_S} \sim \exp\left(-\frac{a}{T}\right)$$

# Fatos Experimentais: Efeito Meissner



# Fatos Experimentais: Efeito Meissner




- Campos magnéticos suficientemente baixos

# Fatos Experimentais: Efeito Meissner

# Fatos Experimentais: Campo Magnético Crítico $H_c$

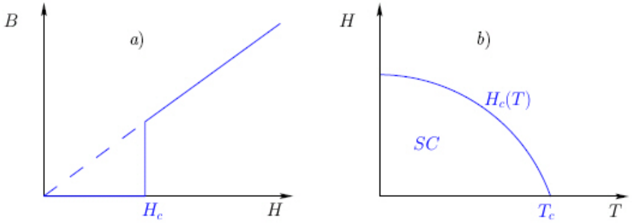



Figure 3: Magnetic properties of type I superconductors.

# Fatos Experimentais: Campo Magnético Crítico $H_c$

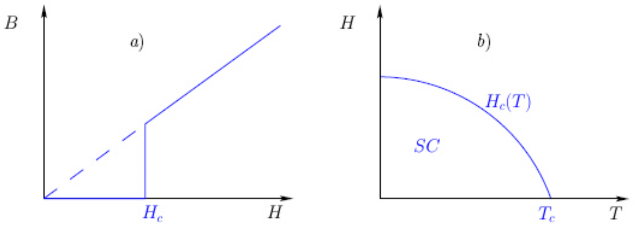
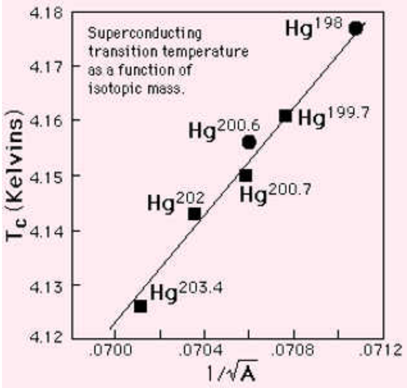



Figure 3: Magnetic properties of type I superconductors.

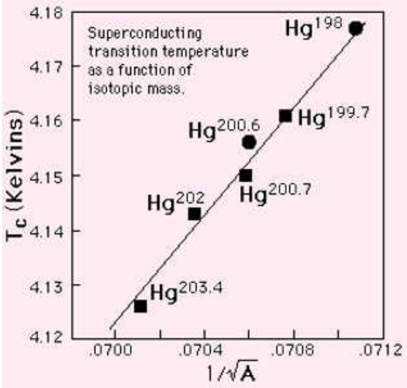
$$H_c(T) = H_c(0)\left[1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right]$$

$H > H_c(T)$ para dada T: amostra volta ao estado normal

# Fatos Experimentais: Efeito Isótopo



# Fatos Experimentais: Efeito Isótopo




Troca de um dos isótopos de uma rede cristalina gera um shift em alguns observáveis.

$$T_c \propto M^{-\frac{1}{2}}$$

# Modelo de Gorter-Casimir

- Ansatz para a energia livre

# Modelo de Gorter-Casimir

- Ansatz para a energia livre

$$F(x,T) = \sqrt{x} f_n(T) + (1-x) f_S(T)$$

- $x \equiv$ fração de elétrons no fluido normal
- $(1-x) \equiv$ fração de elétrons no superfluido

$$f_n(T) \equiv -\frac{\gamma}{2} T^2 \qquad \left( C_v = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = \gamma T \right)$$

$$f_S(T) \equiv -\beta = \text{cte}$$

# Modelo de Gorter-Casimir

- Minimizando a energia em relação a $x$:

$$x = \frac{\gamma^2}{16\beta^2} T^4$$

Fazendo $x = 1$, obtemos a temperatura crítica:

$$T_c^2 = \frac{4\beta}{\gamma}$$

Juntando as expressões,

$$x = \left(\frac{T}{T_c}\right)^4$$

$T = 0 \rightarrow x = 0 \rightarrow$ todos os elétrons no estado SC

# Modelo de Gorter-Casimir

Reescrevendo a energia livre:

$$F_S(T) = -\beta\left[1 + \left(\frac{T}{T_c}\right)^4\right]$$

Com

$$F_S(T) + \frac{H_c^2(T)}{8\pi} = F_n(T) \quad \rightarrow \text{destruição da SC por um campo crítico } H_c$$

Temos:

$$H_c(T) = 8\pi\beta\left[1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right]$$

# Modelo de Gorter-Casimir

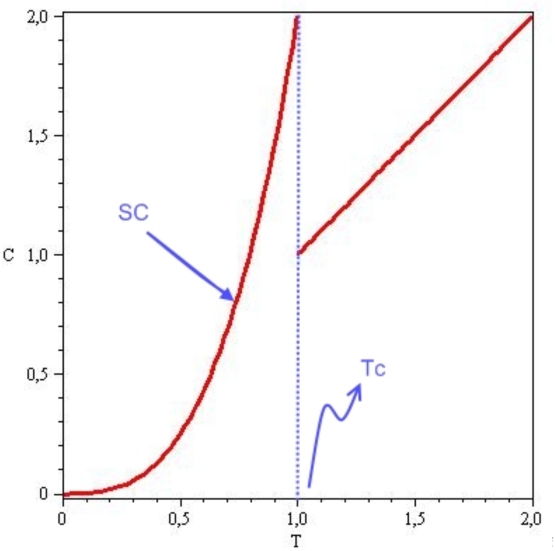
Calor Específico:

$$C_v = -T\frac{\partial^2 F(T)}{\partial T^2}$$

$$C_{v_n} = \gamma T$$

$$C_{v_S} = 3\gamma T_c \left(\frac{T}{T_c}\right)^3$$

# Modelo de Gorter-Casimir



# Considerações Iniciais

- Energia livre ($F$) como um funcional de um campo $\psi$

# Considerações Iniciais

- Energia livre $(F)$ como um funcional de um campo $\psi$
- $\psi$ deve descrever as possíveis fases do sistema

# Considerações Iniciais

- Energia livre ($F$) como um funcional de um campo $\psi$
- $\psi$ deve descrever as possíveis fases do sistema

$\psi \rightarrow$ parâmetro de ordem do sistema:

- $\psi = 0$ na fase de alta temperatura ($T > T_c$)
- $\psi \neq 0$ para $T < T_c$

$$F[\psi] = F_n[\psi] + \frac{1}{V}\int d^3x \left[ a\frac{T - T_c}{T_c}|\psi(\vec{x})|^2 + \frac{b}{2}|\psi(\vec{x})|^4 + \right.$$

$$\left. + \ldots + \frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\psi(\vec{x})|^2 \right]$$

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

- Considerando $|\psi(\vec{x})| \equiv |\psi|$ uma função homogênea:

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

- Considerando $|\psi(\vec{x})| \equiv |\psi|$ uma função homogênea:

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

- Considerando $|\psi(\vec{x})| \equiv |\psi|$ uma função homogênea:

$$F[\psi] = F_n[\psi] + V(|\psi|)$$

$$V(|\psi|) = a\frac{T - T_c}{T_c}|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4$$

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

- Considerando $|\psi(\vec{x})| \equiv |\psi|$ uma função homogênea:

$$F[\psi] = F_n[\psi] + V(|\psi|)$$

$$V(|\psi|) = a\frac{T - T_c}{T_c}|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4$$

- Minimizando $V$ em relação a $\psi$:

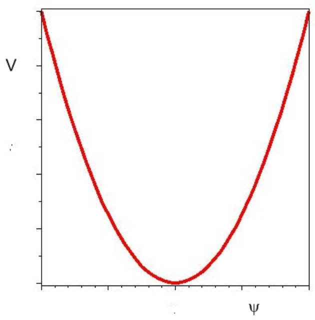
$$\begin{aligned} \psi_1 &= 0 \\ \psi_2 &= i\sqrt{\frac{a}{b}\frac{T - T_c}{T_c}} \\ \psi_3 &= -i\sqrt{\frac{a}{b}\frac{T - T_c}{T_c}} \end{aligned}$$

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

- Caso $T > T_c$: $\boxed{T - T_c \to |T - T_c|}$

$$\left.\frac{d^2V}{d\psi^2}\right|_{\psi_1} = 2a\frac{|T - T_c|}{T_c} > 0 \therefore \psi_1 \text{ é mínimo}$$

$$\langle|\psi|\rangle = 0 \text{ (valor esperado)}$$



# Ginzburg-Landau sem campo magnético

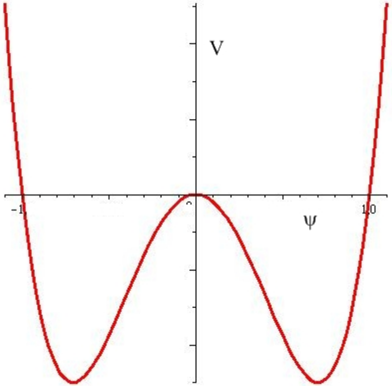
- Caso $T < T_c$: $\boxed{T - T_c \rightarrow -|T - T_c|}$

$$\left.\frac{d^2V}{d\psi^2}\right|_{\psi_1} = -2a\frac{|T - T_c|}{T_c} < 0 \therefore \psi_1 \text{ é máximo}$$

$$\left.\frac{d^2V}{d\psi^2}\right|_{\psi_2} > 0 \therefore \psi_2 \text{ é mínimo}$$

$$\left.\frac{d^2V}{d\psi^2}\right|_{\psi_3} > 0 \therefore \psi_3 \text{ é mínimo}$$

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

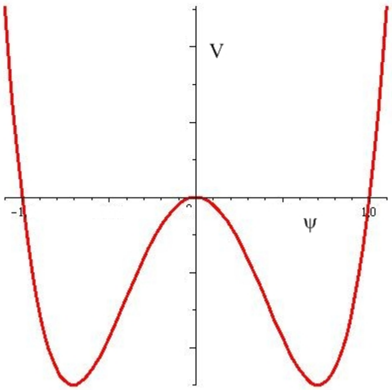



$$\langle|\psi|\rangle = \pm\sqrt{\frac{a}{b}\frac{|T-T_c|}{T_c}}$$

(valor esperado)

Escolhendo um dos vácuos, a simetria é quebrada...

# Ginzburg-Landau sem campo magnético




$$\langle|\psi|\rangle = \pm\sqrt{\frac{a}{b}\frac{|T-T_c|}{T_c}}$$

(valor esperado)

Escolhendo um dos vácuos, a simetria é quebrada...

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

Temos então:

- Parâmetro de Ordem nulo $\rightarrow$ sistema na fase normal $(F(T) = F_n(T))$

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

Temos então:

- Parâmetro de Ordem nulo $\rightarrow$ sistema na fase normal $(F(T) = F_n(T))$
- Parâmetro de Ordem não-nulo $\rightarrow$ sistema na fase supercondutora

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

Temos então:

- Parâmetro de Ordem nulo $\rightarrow$ sistema na fase normal $(F(T) = F_n(T))$
- Parâmetro de Ordem não-nulo $\rightarrow$ sistema na fase supercondutora
- Expoente Crítico:

Parâmetro de ordem $\sim \left(\frac{|T-T_c|}{T_c}\right)^{\beta}$

$$|\psi| = \sqrt{\frac{a}{b}\frac{|T - T_c|}{T_c}}$$

$\therefore \beta = \frac{1}{2} \rightarrow$ expoente crítico do modelo de G.L

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

Calor Específico:

$$C_V = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}$$

$$C_V^S = -T\frac{\partial^2}{\partial T^2}\left[F_n(T) - a\frac{|T - T_c|}{T_c}|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4\right]$$

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

Calor Específico:

$$C_V = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}$$

$$C_V^S = -T\frac{\partial^2}{\partial T^2}\left[F_n(T) - a\frac{|T - T_c|}{T_c}|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4\right]$$

- $$C_V^S = \left(\frac{a^2}{bT_c^2}\right)T + C_V^n \quad (T < T_c)$$

# Ginzburg-Landau sem campo magnético

Calor Específico:

$$C_V = -T\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}$$

$$C_V^S = -T\frac{\partial^2}{\partial T^2}\left[F_n(T) - a\frac{|T - T_c|}{T_c}|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4\right]$$

- $$C_V^S = \left(\frac{a^2}{bT_c^2}\right)T + C_V^n \quad (T < T_c)$$
- $$C_V^S = C_V^n = C_V \quad (T > T_c)$$

# Ginzburg-Landau com campo magnético

$$\vec{F} = e\left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}\right)$$

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \qquad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

Força generalizada para potenciais que dependem do tempo:

$$Q_k = -\frac{\partial U}{\partial q_k} + \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_k}\right)$$

# Ginzburg-Landau com campo magnético

$$\vec{F} = e\Big(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B}\Big)$$

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}, \qquad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}$$

Força generalizada para potenciais que dependem do tempo:

$$Q_k = -\frac{\partial U}{\partial q_k} + \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_k}\right)$$

Problema: $U = ???$

$$\vec{F} = e\left( -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t} + \frac{\vec{v}}{c} \times (\nabla \times \vec{A})\right)$$

# Ginzburg-Landau com campo magnético

Depois de algumas manipulações,

$$\vec{F} = -\nabla\left(e\phi - \frac{e}{c}\vec{v}.\vec{A}\right) + \frac{d}{dt}\left[\nabla_v\left(e\phi - \frac{e}{c}\vec{v}.\vec{A}\right)\right]$$

# Ginzburg-Landau com campo magnético

Depois de algumas manipulações,

$$\vec{F} = -\nabla\left(e\phi - \frac{e}{c}\vec{v}.\vec{A}\right) + \frac{d}{dt}\left[\nabla_v\left(e\phi - \frac{e}{c}\vec{v}.\vec{A}\right)\right]$$

$$L = \frac{m}{2}v^2 - e\phi + \frac{e}{c}\vec{v}.\vec{A}$$

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\phi$$

# Ginzburg-Landau com campo magnético

Depois de algumas manipulações,

$$\vec{F} = -\nabla\left(e\phi - \frac{e}{c}\vec{v}.\vec{A}\right) + \frac{d}{dt}\left[\nabla_v\left(e\phi - \frac{e}{c}\vec{v}.\vec{A}\right)\right]$$

$$L = \frac{m}{2}v^2 - e\phi + \frac{e}{c}\vec{v}.\vec{A}$$

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 + e\phi$$

Eliminando o campo elétrico $\rightarrow \phi = 0,\ \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} = 0$:

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2$$

# Ginzburg-Landau com campo magnético

$$F[\psi] = F_n[\psi] + \frac{1}{V}\int d^3x \left[ a\frac{T-T_c}{T_c}|\psi(\vec{x})|^2 + \frac{b}{2}|\psi(\vec{x})|^4 + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2m}\left|\Big(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{x})\Big)\psi(\vec{x})\right|^2 + \frac{1}{8\pi}\vec{B}^2 \right]$$

# Ginzburg-Landau com campo magnético

- Derivada Funcional:

$$\left(\frac{d}{d\epsilon}F[f+\epsilon\sigma]\right)_{\epsilon=0} \equiv \int d^n x \sigma(x) \frac{\delta F}{\delta f(x)}$$

Ex.: $F[\vec{A}] = \int d^3x \vec{A}(\vec{x})$

$$F[\vec{A}+\epsilon\vec{\sigma}] = \int d^3x(\vec{A}(\vec{x})+\epsilon\vec{\sigma}(x)) = \int d^3x\vec{A}(\vec{x}) + \epsilon\int d^3x\vec{\sigma}(x)$$

$$\frac{dF[\vec{A}+\epsilon\vec{\sigma}]}{d\epsilon} = \int d^3x\vec{\sigma}(x)$$

$$\frac{\delta F}{\delta\vec{A}(\vec{x})} = 1$$

# Ginzburg-Landau com campo magnético

- Variando a energia em relação a $\vec{A}$:

$$\frac{1}{4\pi}\nabla\times\vec{B}=\frac{\hbar e}{2mc}\left[\psi^*\left(\frac{1}{i}\nabla-\frac{e}{\hbar c}\vec{A}\right)\psi+\psi\left(-\frac{1}{i}\nabla-\frac{e}{\hbar c}\vec{A}\right)\psi^*\right]$$

$$\nabla\times\vec{B}=\frac{4\pi}{c}\vec{j}$$

# Ginzburg-Landau com campo magnético

- Variando a energia em relação a $\vec{A}$:

$$\frac{1}{4\pi}\nabla \times \vec{B} = \frac{\hbar e}{2mc}\left[\psi^*\left(\frac{1}{i}\nabla - \frac{e}{\hbar c}\vec{A}\right)\psi + \psi\left(-\frac{1}{i}\nabla - \frac{e}{\hbar c}\vec{A}\right)\psi^*\right]$$

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}$$

Densidade de Supercorrente:

$$\vec{j}s = \frac{\hbar e}{2m}\left[\psi^*\left(\frac{1}{i}\nabla - \frac{e}{\hbar c}\vec{A}\right)\psi + \psi\left(-\frac{1}{i}\nabla - \frac{e}{\hbar c}\vec{A}\right)\psi^*\right]$$

# Ginzburg-Landau com campo magnético

- Variando a energia em relação a $\psi$:

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi + a\frac{T - T_c}{T_c}\psi + b|\psi|^2\psi = 0$$

# Ginzburg-Landau com campo magnético

- Variando a energia em relação a $\psi$:

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi + a\frac{T - T_c}{T_c}\psi + b|\psi|^2\psi = 0$$

$\boxed{\text{Equações de Ginzburg-Landau}}$

# Corrente Crítica

- Supercondutor fino, com dependência espacial unidimensional:

$$\psi = \psi_0 e^{iqx}$$

- Assumindo $\vec{A} = 0$, da segunda eq. de G.L:

$$\left( \frac{\hbar q^2}{2m} + a\frac{T - T_c}{T_c} \right) \psi_0 + b\psi_0^3 = 0$$

# Corrente Crítica

- Supercondutor fino, com dependência espacial unidimensional:

$$\psi = \psi_0 e^{iqx}$$

- Assumindo $\vec{A} = 0$, da segunda eq. de G.L:

$$\left(\frac{\hbar q^2}{2m} + a\frac{T - T_c}{T_c}\right)\psi_0 + b\psi_0^3 = 0$$

$$\begin{aligned}\psi_0 &= 0\\ \psi_0 &= \pm\sqrt{\frac{a}{b}\frac{|T - T_c|}{T_c} - \frac{\hbar q^2}{2mb}}\end{aligned}$$

# Corrente Crítica

- Da equação de supercorrente:

$$j_S = e\left(\frac{\hbar q}{m}\right)|\psi_0|^2$$

$$j_S = e v_S \rho_S$$

## Corrente Crítica

- Da equação de supercorrente:

$$js = e\left(\frac{\hbar q}{m}\right)|\psi_0|^2$$

$$js = ev_S\rho_S$$

Como pela segunda eq de G.L, $\psi_0$ pertence aos Reais,

$$\psi_0 = \pm\sqrt{\frac{a}{b}\frac{|T - T_c|}{T_c} - \frac{\hbar q^2}{2mb}}$$

$$\frac{a}{b}\frac{(T_c - T)}{T_c} \geq \frac{\hbar q^2}{2mb}$$

# Corrente Crítica

- Da equação de supercorrente:

$$j_S = e\left(\frac{\hbar q}{m}\right)|\psi_0|^2$$

$$j_S = e v_S \rho_S$$

Como pela segunda eq de G.L, $\psi_0$ pertence aos Reais,

$$\psi_0 = \pm\sqrt{\frac{a}{b}\frac{|T - T_c|}{T_c} - \frac{\hbar q^2}{2mb}}$$

$$\frac{a}{b}\frac{(T_c - T)}{T_c} \geq \frac{\hbar q^2}{2mb}$$

A Scorrente pode assumir um valor máximo $j_C$. Acima desse valor, o metal possui condução normal

# Efeito Meissner

- SC homogêneo, tal que a densidade de superfluido possa ser considerada constante no espaço:

$$\psi = \psi_0 e^{i\phi(\vec{x})}$$

# Efeito Meissner

- SC homogêneo, tal que a densidade de superfluido possa ser considerada constante no espaço:

$$\psi = \psi_0 e^{i\phi(\vec{x})}$$

Inserindo na eq. de supercorrente:

$$\vec{j}s = \frac{\hbar e}{m}\rho s\left[\nabla\phi(\vec{x}) - \frac{e}{\hbar c}\vec{A}\right]$$

# Efeito Meissner

- SC homogêneo, tal que a densidade de superfluido possa ser considerada constante no espaço:

$$\psi = \psi_0 e^{i\phi(\vec{x})}$$

Inserindo na eq. de supercorrente:

$$\vec{j}_S = \frac{\hbar e}{m}\rho_S\left[\nabla\phi(\vec{x}) - \frac{e}{\hbar c}\vec{A}\right]$$

Aplicando $\nabla\times$ na eq. anterior:

$$\nabla\times\vec{j}_S = -\frac{e^2}{mc}\rho_S\vec{B}$$

$$\frac{4\pi}{c}\nabla\times\vec{j}_S = -\frac{4\pi e^2}{mc^2}\rho_S\vec{B}$$

# Efeito Meissner

- Lembrando que $\frac{4\pi}{c}\vec{j} = \nabla \times \vec{B}$, temos:

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{\lambda_L^2}\vec{B}$$

# Efeito Meissner

- Lembrando que $\frac{4\pi}{c}\vec{j} = \nabla \times \vec{B}$, temos:

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B}$$

Onde

$$\lambda_L \equiv \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi e^2 \rho_S}} \rightarrow \quad \text{Profundidade de penetração de London}$$

# Efeito Meissner

- Lembrando que $\frac{4\pi}{c}\vec{j} = \nabla \times \vec{B}$, temos:

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{\lambda_L^2}\vec{B}$$

Onde

$$\lambda_L \equiv \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi e^2 \rho_S}} \rightarrow \quad \text{Profundidade de penetração de London}$$

Solução 1D simples:

$$B(x) = B_0 e^{-\frac{x}{\lambda_L}}$$

$\rightarrow$ Quanto menor $\lambda_L$, mais “rápido” cai o valor de $B$ dentro da amostra.

# Revisão: BEC

Revisão da idéia de BEC $\rightarrow$

# Revisão: BEC

Revisão da idéia de BEC $\rightarrow$ gás ideal de Bose $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

# Revisão: BEC

Revisão da idéia de BEC $\rightarrow$ gás ideal de Bose $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\ln \mathcal{Z}(T, V, \mu) = -\sum_j \ln\left(1 - \exp\left[-\beta\left(\epsilon_j - \mu\right)\right]\right)$$

$$< n_j >= \frac{1}{\exp\left[\beta(\epsilon_j - \mu)\right] - 1}$$

$$N = \sum_j < n_j >$$

$$U = \sum_j \epsilon_j < n_j >$$

# Revisão: BEC

Revisão da idéia de BEC $\rightarrow$ gás ideal de Bose $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\ln \mathcal{Z}(T, V, \mu) = -\sum_j \ln \left(1 - \exp\left[-\beta\left(\epsilon_j - \mu\right)\right]\right)$$

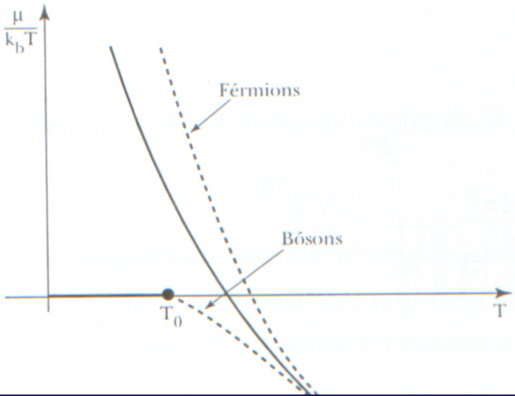
$$< n_j >= \frac{1}{\exp\left[\beta(\epsilon_j - \mu)\right] - 1}$$

$$N = \sum_j < n_j >$$

$$U = \sum_j \epsilon_j < n_j >$$

# Revisão: BEC

$$\frac{\mu}{kT} = \ln\left[\frac{1}{\gamma}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk}\right)^{\frac{3}{2}}\right] + \ln\left(\frac{N}{V}\right) - \frac{3}{2}\ln T$$



# Revisão: Estatística de Bose-Einstein

fazendo $\mu = 0$ no limite termodinâmico:

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2mk}\left[\frac{4\pi^2}{\gamma\Gamma(\frac{3}{2})\zeta(\frac{3}{2})}\right]^{\frac{2}{3}}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$$

# Revisão: Estatística de Bose-Einstein

fazendo $\mu = 0$ no limite termodinâmico:

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2mk}\left[\frac{4\pi^2}{\gamma\Gamma(\frac{3}{2})\zeta(\frac{3}{2})}\right]^{\frac{2}{3}}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$$

$\boxed{T_0 \longrightarrow \text{Temperatura de Bose-Einstein}}$

# Revisão: Estatística de Bose-Einstein

fazendo $\mu = 0$ no limite termodinâmico:

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2mk}\left[\frac{4\pi^2}{\gamma\Gamma(\frac{3}{2})\zeta(\frac{3}{2})}\right]^{\frac{2}{3}}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$$

$\boxed{T_0 \longrightarrow \text{Temperatura de Bose-Einstein}}$

$$N_0 = N\left[1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{2}{3}}\right]$$

# Revisão: Estatística de Bose-Einstein

fazendo $\mu = 0$ no limite termodinâmico:

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2mk}\left[\frac{4\pi^2}{\gamma\Gamma(\frac{3}{2})\zeta(\frac{3}{2})}\right]^{\frac{2}{3}}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$$

$\boxed{T_0 \longrightarrow \text{Temperatura de Bose-Einstein}}$

$$N_0 = N\left[1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{2}{3}}\right]$$

$\boxed{N_0 \longrightarrow \text{Número de partículas no condensado de Bose-Einstein}}$

# Revisão: Estatística de Fermi-Dirac

$$\ln \mathcal{Z}(T, V, \mu) = \sum_j \ln \Big(1 + \exp\Big[-\beta\Big(\epsilon_j - \mu\Big)\Big]\Big)$$

$$< n_j >= \frac{1}{\exp\left[\beta(\epsilon_j - \mu)\right] + 1}$$

# Revisão: Estatística de Fermi-Dirac

$$\ln \mathcal{Z}(T, V, \mu) = \sum_j \ln \Big(1 + \exp\Big[-\beta\Big(\epsilon_j - \mu\Big)\Big]\Big)$$

$$< n_j >= \frac{1}{\exp\left[\beta(\epsilon_j - \mu)\right] + 1}$$

$$N = \sum_j < n_j >$$

# Revisão: Estatística de Fermi-Dirac

$$\ln \mathcal{Z}(T, V, \mu) = \sum_j \ln \left(1 + \exp\left[-\beta\left(\epsilon_j - \mu\right)\right]\right)$$

$$< n_j >= \frac{1}{\exp\left[\beta(\epsilon_j - \mu)\right] + 1}$$

$$N = \sum_j < n_j >$$

$$U = \sum_j \epsilon_j < n_j >$$

# Revisão: Estatística de Fermi-Dirac

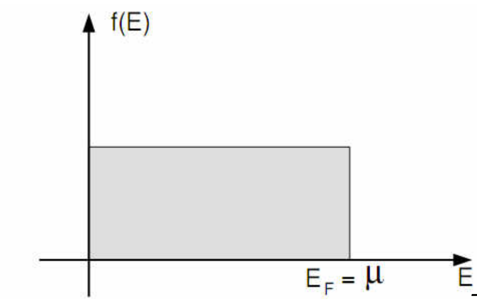
- Gás de Fermi completamente degenerado: $\beta \to \infty$

# Revisão: Estatística de Fermi-Dirac

- Gás de Fermi completamente degenerado: $\beta \to \infty$
- Energia de Fermi $=$ potencial químico em $T = 0$

# Revisão: Estatística de Fermi-Dirac

- Gás de Fermi completamente degenerado: $\beta \to \infty$
- Energia de Fermi = potencial químico em $T = 0$




$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{6\pi^2}{\gamma}\right)^{\frac{2}{3}}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$$

$$\epsilon_F = k_b T_F$$

$$T_F = \frac{\hbar^2}{2mk_b}\left(\frac{6\pi^2}{\gamma}\right)^{\frac{2}{3}}\left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$$

# Revisão: Estatística de Fermi-Dirac

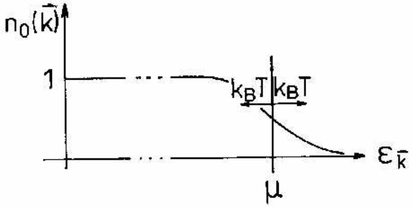
- Gás de Fermi degenerado: $T \ll T_F$

# Revisão: Estatística de Fermi-Dirac

- Gás de Fermi degenerado: $T \ll T_F$
- Alguns elétrons abaixo da $\epsilon_F$ são excitados para estados com energia $> \epsilon_F$

# Revisão: Estatística de Fermi-Dirac

- Gás de Fermi degenerado: $T \ll T_F$
- Alguns elétrons abaixo da $\epsilon_F$ são excitados para estados com energia $> \epsilon_F$




$$U = \gamma V C \left[ \frac{2}{5} \mu^{\frac{5}{2}} + \frac{\pi^2}{4} (k_b T)^2 \mu^{\frac{1}{2}} + \dots \right]$$

$$\mu = \epsilon_F \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 + \dots \right]$$

# Acoplamento elétron-Fônon

- Efeito isótopo dá pistas de que os fônons da rede cristalina têm importante papel na SC.

# Acoplamento elétron-Fônon

- Efeito isótopo dá pistas de que os fônons da rede cristalina têm importante papel na SC.

Hamiltoniana de Frölich:

$$H_F = H_e + H_p + H_{ep}$$

$$H_e = \sum_k \epsilon(\vec{k}) f^\dagger_{\vec{k}} f_{\vec{k}}$$

$$H_p = \sum_q \hbar\omega_{\vec{q}} \left( b^\dagger_{\vec{q}} b_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right)$$

# Acoplamento elétron-Fônon

- Consideramos que os fônons produzem uma alteração local na densidade iônica e que se acoplam à densidade de elétrons

# Acoplamento elétron-Fônon

- Consideramos que os fônons produzem uma alteração local na densidade iônica e que se acoplam à densidade de elétrons

Mudança no potencial iônico $\longrightarrow$ descrito pelo campo $D(\vec{x})$

$$H_{ep} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger_\alpha(\vec{x}) D(\vec{x}) \hat{\psi}_\alpha(\vec{x})$$

# Acoplamento elétron-Fônon

- Consideramos que os fônons produzem uma alteração local na densidade iônica e que se acoplam à densidade de elétrons

Mudança no potencial iônico $\longrightarrow$ descrito pelo campo $D(\vec{x})$

$$H_{ep} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger_\alpha(\vec{x}) D(\vec{x}) \hat{\psi}_\alpha(\vec{x})$$

Mudança na densidade iônica $\longrightarrow$ campos de deslocamento $\vec{u}(\vec{x})$:

$$D(\vec{x}) = \nabla.\vec{u}(\vec{x}) \quad \text{dilatações e contrações locais}$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\vec{u}(\vec{x}) = 0$$

# Acoplamento elétron-Fônon

Em analogia à quantização do campo de Klein-Gordon:

$$\hat{\phi}(\vec{x},t) = \int \frac{d^3p}{\sqrt{2\omega_p(2\pi)^3}} \left( \hat{a}_p e^{i(px-\omega_p t)} + \hat{a}_p^\dagger e^{-i(px-\omega_p t)} \right)$$

$$[\hat{a}_p, \hat{a}_p^\dagger] = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

# Acoplamento elétron-Fônon

Em analogia à quantização do campo de Klein-Gordon:

$$\hat{\phi}(\vec{x}, t) = \int \frac{d^3 p}{\sqrt{2\omega_p (2\pi)^3}} \left( \hat{a}_p e^{i(px - \omega_p t)} + \hat{a}_p^\dagger e^{-i(px - \omega_p t)} \right)$$

$$[\hat{a}_p, \hat{a}_p^\dagger] = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

Na caixa:

$$\int \frac{d^3 p}{\sqrt{(2\pi)^3}} \to \frac{1}{L^3} \sum_l$$

$$[\hat{a}_{p_l}, \hat{a}_{p_{l'}}^\dagger] = \delta_{ll'}$$

# Acoplamento elétron-Fônon

$$\vec{u}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} \frac{\vec{q}}{|\vec{q}|} \left( \frac{\hbar}{2m\omega_{\vec{q}}} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \hat{b}_{\vec{q}} e^{iqx} + \hat{b}^{\dagger}_{\vec{q}} e^{-iqx} \right)$$

O campo $D$ é entao dado por (com $\omega_q = v_S q$):

$$\vec{D}(\vec{x}) = \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} \left( \frac{\hbar q}{2Mv_S} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \hat{b}_{\vec{q}} e^{iqx} - \hat{b}^{\dagger}_{\vec{q}} e^{-iqx} \right]$$

# Acoplamento elétron-Fônon

$$\vec{u}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} \frac{\vec{q}}{|\vec{q}|} \left( \frac{\hbar}{2m\omega_{\vec{q}}} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \hat{b}_{\vec{q}} e^{iqx} + \hat{b}_{\vec{q}}^{\dagger} e^{-iqx} \right)$$

O campo $D$ é entao dado por (com $\omega_q = v_S q$):

$$\vec{D}(\vec{x}) = \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} \left( \frac{\hbar q}{2Mv_S} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \hat{b}_{\vec{q}} e^{iqx} - \hat{b}_{\vec{q}}^{\dagger} e^{-iqx} \right]$$

Operadores de campo eletrônico em termos de estados de Bloch:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{\alpha}(\vec{x}) &= \sum_{k} f_{\vec{k}\alpha} u_{\vec{k}}(\vec{x}) e^{ikx} \\ \hat{\psi}_{\beta}(\vec{x})^{\dagger} &= \sum_{k} f_{\vec{k}\beta} u_{\vec{k}}(\vec{x})^{*} e^{-ikx} \end{aligned}$$

# Acoplamento elétron-Fônon

$$H_{ep} = \int d^3x \left( \sum_k f_{\vec{k}\alpha} u_{\vec{k}}(\vec{x}) e^{ikx} \right) \times$$

$$\times \left( \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} \left( \frac{\hbar q}{2Mv_S} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \hat{b}_{\vec{q}} e^{iqx} - \hat{b}^{\dagger}_{\vec{q}} e^{-iqx} \right] \right) \times$$

$$\times \left( \sum_{k'} f_{\vec{k}'\beta} u_{\vec{k}'}(\vec{x})^* e^{-ik'x} \right)$$

# Acoplamento elétron-Fônon

$$H_{ep} =$$

$$= \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} \left( \frac{\hbar q}{2Mv_S} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \sum_{kk'} f_{\vec{k}'\alpha} f^{\dagger}_{\vec{k}'\alpha} \int d^3x u_{\vec{k}}(\vec{x}) u_{\vec{k}'}(\vec{x})^* e^{i(q+k+k')x} b_{\vec{q}} \right] +$$

$$- \frac{i}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{q}} \left( \frac{\hbar q}{2Mv_S} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \sum_{kk'} f_{\vec{k}'\alpha} f^{\dagger}_{\vec{k}'\alpha} \int d^3x u_{\vec{k}}(\vec{x}) u_{\vec{k}'}(\vec{x})^* e^{-i(q-k+k')x} b^{\dagger}_{\vec{q}} \right]$$

# Acoplamento elétron-Fônon

Funções de Wannier:

$$\hat{\phi}_R(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR} \hat{\psi}_k(r)$$

$$\phi_R(r) = \phi_{R+R'}(r + R')$$

$$\phi(r - R) \equiv \phi_R(r)$$

# Acoplamento elétron-Fônon

Funções de Wannier:

$$\text{função de Wannier} \leftarrow \hat{\phi}_R(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikR} \hat{\psi}_k(r) \rightarrow \text{função de Bloch}$$

$$\phi_R(r) = \phi_{R+R'}(r + R')$$

$$\phi(r - R) \equiv \phi_R(r)$$

# Acoplamento elétron-Fônon

Reescrevendo a hamiltoniana:

$$H_{ep} = i\sum_{\vec{k},\vec{q}} D_{\vec{q}}\left(b_{\vec{q}} f^{\dagger}_{\vec{k}+\vec{q},\alpha} f_{\vec{k},\alpha} - b^{\dagger}_{\vec{q}} f^{\dagger}_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} f_{\vec{k},\alpha}\right)$$

Definindo o operador densidade eletrônica:

$$\rho_{\vec{q}} \sum_{\vec{k}} f^{\dagger}_{\vec{k}-\vec{q},\alpha} f_{\vec{k},\alpha} = \rho^{\dagger}_{-\vec{q}}$$

$$H_F = \sum_{k} \epsilon(\vec{k}) f^{\dagger}_{\vec{k}} f_{\vec{k}} + \sum_{q} \hbar\omega_{\vec{q}}\left(b^{\dagger}_{\vec{q}} b_{\vec{q}} + \frac{1}{2}\right) + i\sum_{\vec{k},\vec{q}} D_{\vec{q}}\left(b_{\vec{q}}\rho^{\dagger}_{\vec{q}} - b^{\dagger}_{\vec{q}}\rho_{\vec{q}}\right)$$

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

- Extrair interação elétron-elétron da interação elétron-fônon

Definindo um operador anti-unitário $S$, para que $e^S$ seja unitário, e a transformação

$$\tilde{H}_F = e^{-S} H_F e^S$$

seja unitária.

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

- Extrair interação elétron-elétron da interação elétron-fônon

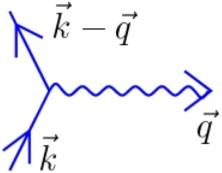
Definindo um operador anti-unitário $S$, para que $e^S$ seja unitário, e a transformação

$$\tilde{H}_F = e^{-S} H_F e^S$$

seja unitária.
Expandindo:

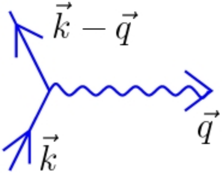
$$\tilde{H}_F = H_F + [H_F, S] + \frac{1}{2!}[[H_F, S], S] + \frac{1}{3!}[[[H_F, S], S], S] + \dots$$

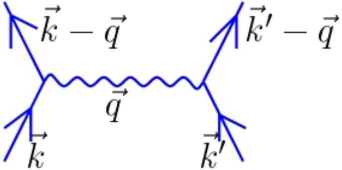
# Interação Elétron-Elétron Efetiva




Fônon criado ou aniquilado no espalhamento

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

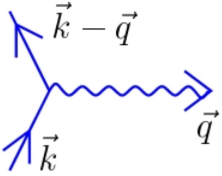


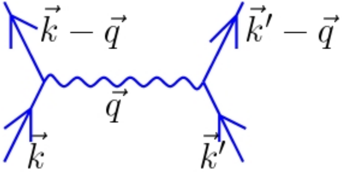




Fônon criado ou aniquilado no espalhamento

Fônon criado interage com outro elétron

# Interação Elétron-Elétron Efetiva




Fônon criado ou aniquilado no espalhamento

Fônon criado interage com outro elétron

Processo ocorre apenas em segunda ordem na interação elétron-fônon $\longrightarrow$ $\boxed{\text{Eliminar contribuições de primeira ordem}}$

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

$$H_F = H_0 + \lambda H_{ep}$$

$$\tilde{H}_F = H_0 + \lambda H_{ep} + [H_0, S] + \lambda[H_{ep}, S] + \frac{1}{2}[[H_0 + \lambda H_{ep}, S], S] + \dots$$

Impondo $\lambda H_{ep} + [H_0, S] = 0$, e calculando os elementos de matriz nos autoestados $|m\rangle$ de $H_0$:

$$\lambda \langle n| H_{ep} |m\rangle = \langle n| [S, H_0] |m\rangle$$

$$\langle n| S |m\rangle = \lambda \frac{\langle n| H_{ep} |m\rangle}{E_m - E_n}$$

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

Na próxima ordem não-nula:

$$\lambda[H_{ep}, S] + \frac{1}{2}[[H_0 + \lambda H_{ep}, S], S] = \lambda[H_{ep}, S] - \frac{\lambda}{2}[H_{ep}, S]$$

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

Na próxima ordem não-nula:

$$\lambda[H_{ep}, S] + \frac{1}{2}[[H_0 + \lambda H_{ep}, S], S] = \lambda[H_{ep}, S] - \frac{\lambda}{2}[H_{ep}, S]$$

$$\langle n| [H_{ep}, S] |m\rangle = ?$$

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

Na próxima ordem não-nula:

$$\lambda[H_{ep}, S] + \frac{1}{2}[[H_0 + \lambda H_{ep}, S], S] = \lambda[H_{ep}, S] - \frac{\lambda}{2}[H_{ep}, S]$$

$$\langle n| [H_{ep}, S] |m\rangle = ?$$

$$\langle n| H_{ep} S |m\rangle = \sum_{l} \langle n| H_{ep} |l\rangle \langle l| S |m\rangle$$

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

Na próxima ordem não-nula:

$$\lambda[H_{ep}, S] + \frac{1}{2}[[H_0 + \lambda H_{ep}, S], S] = \lambda[H_{ep}, S] - \frac{\lambda}{2}[H_{ep}, S]$$

$$\langle n| [H_{ep}, S] |m\rangle = ?$$

$$\langle n| H_{ep}S |m\rangle = \sum_{l} \langle n| H_{ep} |l\rangle \langle l| S |m\rangle$$

$$\langle n| H_{ep}S |m\rangle = \lambda \sum_{l} \frac{\langle n| H_{ep} |l\rangle \langle l| H_{ep} |m\rangle}{(E_l - E_m)}$$

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

- considerando estados com zero fônons (fenômeno de baixa temperatura):

$$\langle n| H_{ep} S |m\rangle \rightarrow \frac{\langle 0| H_{ep} |1q\rangle \langle 1q| H_{ep} |0\rangle}{(E_m - E_l)} =$$

$$= D_q^2 \sum_{kk'} f_{k'}^{\dagger} f_{k'-q} f_{k'-q}^{\dagger} f_k \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \hbar\omega_q}$$

$$\langle n| S H_{ep} |m\rangle = D_q^2 \sum_{kk'} f_{k'}^{\dagger} f_{k'-q} f_{k'-q}^{\dagger} f_k \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} + \hbar\omega_q}$$

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

- considerando estados com zero fõnons (fenômeno de baixa temperatura):

$$\langle n| H_{ep} S |m\rangle \rightarrow \frac{\langle 0| H_{ep} |1q\rangle \langle 1q| H_{ep} |0\rangle}{(E_m - E_l)} =$$

$$= D_q^2 \sum_{kk'} f_{k'}^{\dagger} f_{k'-q} f_{k'-q}^{\dagger} f_k \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \hbar\omega_q}$$

$$\langle n| SH_{ep} |m\rangle = D_q^2 \sum_{kk'} f_{k'}^{\dagger} f_{k'-q} f_{k'-q}^{\dagger} f_k \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} + \hbar\omega_q}$$

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

Somando todas as contribuições:

$$H_{ep} = \sum_{\vec{q},\vec{k},\vec{k}'} W_{\vec{k}\vec{q}} f^{\dagger}_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}} f^{\dagger}_{\vec{k}'-\vec{q}} f_{\vec{k}}$$

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

Somando todas as contribuições:

$$H_{ep} = \sum_{\vec{q},\vec{k},\vec{k}'} W_{\vec{k}\vec{q}} f^{\dagger}_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}} f^{\dagger}_{\vec{k}'-\vec{q}} f_{\vec{k}}$$

$$W_{\vec{k}\vec{q}} = \frac{D_q^2 \hbar\omega_{\vec{q}}}{(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})^2 - \hbar^2\omega_{\vec{q}}^2}$$

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

Somando todas as contribuições:

$$H_{ep} = \sum_{\vec{q},\vec{k},\vec{k}'} W_{\vec{k}\vec{q}} f^{\dagger}_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}} f^{\dagger}_{\vec{k}'-\vec{q}} f_{\vec{k}}$$

$$W_{\vec{k}\vec{q}} = \frac{D_q^2 \hbar\omega_{\vec{q}}}{(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})^2 - \hbar^2\omega_{\vec{q}}^2}$$

- significa que para uma pequena região ao redor da energia de Fermi com $|\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}| < \hbar\omega_{\vec{q}}$ uma interação atrativa entre elétrons ocorre.

# Interação Elétron-Elétron Efetiva

Somando todas as contribuições:

$$H_{ep} = \sum_{\vec{q},\vec{k},\vec{k}'} W_{\vec{k}\vec{q}} f^{\dagger}_{\vec{k}'} f_{\vec{k}'-\vec{q}} f^{\dagger}_{\vec{k}'-\vec{q}} f_{\vec{k}}$$

$$W_{\vec{k}\vec{q}} = \frac{D_q^2 \hbar\omega_{\vec{q}}}{(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})^2 - \hbar^2\omega_{\vec{q}}^2}$$

- significa que para uma pequena região ao redor da energia de Fermi com $|\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}| < \hbar\omega_{\vec{q}}$ uma interação atrativa entre elétrons ocorre.
- Novo estado ligado entre férmions surge $\longrightarrow$ Pares de Cooper.

# Teoria BCS

- Ordem de grandeza do par de cooper: $\approx 10^{-4} cm = 10^{4}$ ângstrons
- estimativa do espaço ocupado por um elétron: $\approx (2A)^{3}$
- $\approx 10^{11}$ elétrons

# Teoria BCS

- Ordem de grandeza do par de cooper: $\approx 10^{-4} cm = 10^4$ ângstrons
- estimativa do espaço ocupado por um elétron: $\approx (2A)^3$
- $\approx 10^{11}$ elétrons
- É inviável construir funções de onda para cada par de elétrons.

# Teoria BCS

- Ordem de grandeza do par de cooper: $\approx 10^{-4} cm = 10^{4}$ ângstrons
- estimativa do espaço ocupado por um elétron: $\approx (2A)^{3}$
- $\approx 10^{11}$ elétrons
- É inviável construir funções de onda para cada par de elétrons.

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\vec{k},\sigma} f^{\dagger}_{\vec{k},\sigma} f_{\vec{k},\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} W_{kk'} f^{\dagger}_{k} f^{\dagger}_{-k} f_{-k'} f_{k'}$$

# Teoria BCS

- Ordem de grandeza do par de cooper: $\approx 10^{-4} cm = 10^4$ ângstrons
- estimativa do espaço ocupado por um elétron: $\approx (2A)^3$
- $\approx 10^{11}$ elétrons
- É inviável construir funções de onda para cada par de elétrons.

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\vec{k},\sigma} f^{\dagger}_{\vec{k},\sigma} f_{\vec{k},\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} W_{kk'} f^{\dagger}_{k} f^{\dagger}_{-k} f_{-k'} f_{k'}$$

$$W_{kk'} < 0 \text{ para } |\epsilon(\vec{k}) - \epsilon_F| < \frac{\delta}{2} \text{ e } |\epsilon(\vec{k}') - \epsilon_F| < \frac{\delta}{2}$$

# Teoria BCS

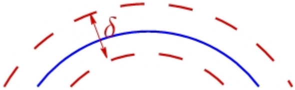
- Ordem de grandeza do par de cooper: $\approx 10^{-4}cm = 10^{4}$ ângstrons
- estimativa do espaço ocupado por um elétron: $\approx (2A)^{3}$
- $\approx 10^{11}$ elétrons
- É inviável construir funções de onda para cada par de elétrons.

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\vec{k},\sigma} f^{\dagger}_{\vec{k},\sigma} f_{\vec{k},\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} W_{kk'} f^{\dagger}_{k} f^{\dagger}_{-k} f_{-k'} f_{k'}$$

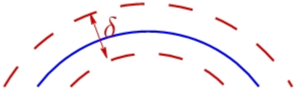
$$W_{kk'} < 0 \ \text{ para } \ |\epsilon(\vec{k}) - \epsilon_F| < \frac{\delta}{2} \ \text{ e } \ |\epsilon(\vec{k}') - \epsilon_F| < \frac{\delta}{2}$$

$$W_{kk'} = 0 \ \text{ para todos os outros casos}$$

# Teoria BCS



# Teoria BCS

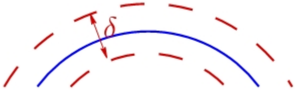



Para simplificar os cálculos com a hamiltoniana de interação:

$$
\begin{aligned}
f_{-k} f_k &= \langle f_{-k} f_k \rangle + (f_{-k} f_k - \langle f_{-k} f_k \rangle) \\
f_k^\dagger f_{-k}^\dagger &= \langle f_k^\dagger f_{-k}^\dagger \rangle + (f_k^\dagger f_{-k}^\dagger - \langle f_k^\dagger f_{-k}^\dagger \rangle)
\end{aligned}
$$

$\psi_k \equiv \langle f_{-k} f_k \rangle$

# Teoria BCS




Para simplificar os cálculos com a hamiltoniana de interação:

$$\begin{aligned} f_{-k} f_k &= \langle f_{-k} f_k \rangle + (f_{-k} f_k - \langle f_{-k} f_k \rangle) \\ f_k^\dagger f_{-k}^\dagger &= \langle f_k^\dagger f_{-k}^\dagger \rangle + (f_k^\dagger f_{-k}^\dagger - \langle f_k^\dagger f_{-k}^\dagger \rangle) \end{aligned}$$

$\psi_k \equiv \langle f_{-k} f_k \rangle$
Aproximação: desprezar termos quadráticos na flutuação

$$H_{\mathrm{BCS}} - \mu \hat{N} \approx \sum_k [\epsilon(\vec{k}) - \mu] f_k^\dagger f_k + \frac{1}{2} \sum_{kk'} W_{kk'} (f_k^\dagger f_{-k}^\dagger \psi_{k'} + \psi_k^* f_{-k'} f_{k'} - \psi_k^* \psi_{k'})$$

# Teoria BCS

Diagonalização: transformação de Bogoliubov

$$
\begin{aligned}
f_k &= u_k \gamma_k + v_k \gamma_{-k}^\dagger \\
f_k &= u_k \gamma_k + v_k \gamma_{-k}^\dagger
\end{aligned}
$$

com

$$
\begin{aligned}
u_k &= u_{-k} \\
v_k &= -v_{-k} \\
u_k^2 &+ v_k^2 = 1
\end{aligned}
\qquad
\begin{aligned}
\{\gamma_k, \gamma_{k'}^\dagger\} &= \delta_{kk'} \\
\{\gamma_k, \gamma_{k'}\} &= \{\gamma_k^\dagger, \gamma_{k'}^\dagger\} = 0
\end{aligned}
$$

# Teoria BCS

$$H_{\mathrm{BCS}} - \mu N = \sum_k \left( [\epsilon(\vec{k}) - \mu](u_k^2 - v_k^2) - 2 \sum_{k'} W_{kk'} \psi_{k'} u_k v_k \right) \gamma_k^\dagger \gamma_k +$$

$$+ \sum_k \left( [\epsilon(\vec{k}) - \mu] u_k v_k + \frac{1}{2} \sum_{k'} W_{kk'} \psi_{k'} (u_k^2 - v_k^2) \right) (\gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger + \gamma_{-k} \gamma_k)$$

# Teoria BCS

$$H_{\text{BCS}} - \mu N = \sum_k \left( [\epsilon(\vec{k}) - \mu](u_k^2 - v_k^2) - 2\sum_{k'} W_{kk'}\psi_{k'} u_k v_k \right) \gamma_k^\dagger \gamma_k +$$

$$+ \sum_k \left( [\epsilon(\vec{k}) - \mu] u_k v_k + \frac{1}{2}\sum_{k'} W_{kk'}\psi_{k'}(u_k^2 - v_k^2) \right) (\gamma_k^\dagger \gamma_{-k}^\dagger + \gamma_{-k}\gamma_k)$$

Definindo

$$[\epsilon(\vec{k}) - \mu] u_k v_k \equiv -\frac{1}{2}\sum_{k'} W_{kk'}\psi_{k'}(u_k^2 - v_k^2)$$

o termo não-diagonal é eliminado.

# Teoria BCS

Definindo

$$\Delta_k = -\sum_{k'} W_{kk'}\psi_{k'}$$

Temos que resolver o sistema

$$\begin{aligned}[\epsilon(\vec{k}) - \mu]u_k v_k &= \Delta_k(u_k^2 - v_k^2) \\ u_k^2 + v_k^2 &= 1\end{aligned}$$

# Teoria BCS

Definindo

$$\Delta_k = -\sum_{k'} W_{kk'}\psi_{k'}$$

Temos que resolver o sistema

$$\begin{aligned} [\epsilon(\vec{k}) - \mu]u_k v_k &= \Delta_k(u_k^2 - v_k^2) \\ u_k^2 + v_k^2 &= 1 \end{aligned}$$

Para facilitar,

$$\begin{aligned} u_k &= \cos\phi_k \\ v_k &= \sin\phi_k \end{aligned}$$

# Teoria BCS

Definindo

$$\Delta_k = -\sum_{k'} W_{kk'}\psi_{k'}$$

Temos que resolver o sistema

$$\begin{aligned} [\epsilon(\vec{k}) - \mu]u_k v_k &= \Delta_k(u_k^2 - v_k^2) \\ u_k^2 + v_k^2 &= 1 \end{aligned}$$

Para facilitar,

$$\begin{aligned} u_k &= \cos\phi_k \\ v_k &= \sin\phi_k \end{aligned}$$

# Teoria BCS

$$\begin{aligned}\cos 2\phi_k &= u_k^2 - v_k^2 = \pm\frac{\epsilon(\vec{k}) - \mu}{E_k} \\ \sin 2\phi_k &= u_k v_k = \pm\frac{\Delta_k}{E_k}\end{aligned}$$

$$E_k = \sqrt{[\epsilon(\vec{k}) - \mu]^2 + \Delta_k^2}$$

# Teoria BCS

$$\begin{aligned}\cos 2\phi_k &= u_k^2 - v_k^2 = \pm\frac{\epsilon(\vec{k})-\mu}{E_k}\\ \sin 2\phi_k &= u_k v_k = \pm\frac{\Delta_k}{E_k}\end{aligned}$$

$$E_k = \sqrt{[\epsilon(\vec{k})-\mu]^2 + \Delta_k^2}$$

Finalmente,

$$\tilde{H} = \sum_k E_k \gamma_k^\dagger \gamma_k$$

Portanto o espectro das quase-partículas possui um gap $\Delta_k$.

# Teoria BCS

No estado fundamental:

$$\gamma_k \left|0\right\rangle = 0$$

$$\psi_k = \langle f_{-k} f_k \rangle = \frac{\Delta_k}{E_k}$$

$$\Delta_k = -\frac{1}{2} \sum_{k'} W_{kk'} \frac{\Delta'_k}{E'_k}$$

## Teoria BCS

Definindo $\xi_k \equiv \epsilon(\vec{k}) - \mu$,

$$W_{kk'} = -\frac{\lambda}{V}\theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|)\theta(\hbar\omega_D - |\xi'_k|)$$

$$\Delta_k = \frac{\lambda}{2V}\sum_{k'}\theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|)\theta(\hbar\omega_D - |\xi'_k|)\frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}}$$

com uma solução $\Delta_k = \Delta\theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|)$,

$$1 = \frac{\lambda}{2V}\sum_{k}\frac{\theta(\hbar\omega_D - |\xi_k|)}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_k^2}}$$

# Teoria BCS

Usando o limite contínuo:

$$\frac{1}{V}\sum_k \rightarrow \int d\xi N(\xi) \approx N(0)\int d\xi \quad (\hbar\omega_D \ll \epsilon_F)$$

$N \rightarrow$ densidade de estados de partícula única disponível para as partículas do sistema.

$$1 = \frac{\lambda N(0)}{2}\int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\xi \frac{1}{\sqrt{\Delta^2+\xi_k^2}} =$$

$$= \lambda N(0)\ln\left[\frac{\hbar\omega_D + \sqrt{(\hbar\omega_D)^2+\Delta^2}}{\Delta}\right] \approx \lambda N(0)\ln\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta}$$

# Teoria BCS

$$\Delta = 2\hbar\omega_D \exp -\frac{1}{\lambda N(0)}$$

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

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2}\left[1 + \frac{\xi_k}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_k^2}}\right] \\ v_k^2 &= \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\xi_k}{\sqrt{\Delta^2 + \xi_k^2}}\right] \end{aligned}$$

$\langle f_k^\dagger f_k \rangle = v_k^2 \rightarrow$ número de ocupação dos férmions originais no novo estad

Para $\Delta = 0$,

# Teoria BCS

$\langle f_k^\dagger f_k \rangle = v_k^2 \rightarrow$ Número de ocupação dos férmions originais no novo estado undamental

Para $\Delta = 0$,

$$v_k^2 = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\xi_k}{|\xi_k|}\right] = \theta[\epsilon(\vec{k}) - \mu],$$

o que é esperado para férmions livres.