

Superconduttori e Teoria BCS

Lorenzo Monacelli

8 febbraio 2017

Indice

1	Introduzione	4
1.1	Introduzione storica	4
1.2	Campo magnetico in un conduttore ideale	7
1.3	Equazioni di London	11
1.3.1	Diamagnetismo nei superconduttori	14
1.3.2	Corrente critica	16
1.3.3	Corrente di screening	16
1.3.4	Disomogeneità indotta e intrinseca	17
1.4	Superconduttori di Tipo II	20
1.5	Campo magnetico quantistico	22
1.5.1	Quantizzazione del campo	23
1.6	Lunghezza di coerenza	26
1.7	Quantizzazione del flusso in un anello superconduttivo	28
1.7.1	Monopoli di Dirac	31
1.7.2	Resistenza alla rottura dello stato SC	32
1.8	Effetto Josefson	33
1.8.1	Tunnelling quantistico delle coppie di Cooper	33
1.8.2	Effetto Josefson alternato	36
1.8.3	Macroscopic Quantum Interference	37
2	Teoria dei fononi	39
2.1	Seconda quantizzazione dei fononi	41
2.1.1	Dispersione classica	41
2.1.2	Quantizzazione dei modi normali	42
2.1.3	Fluttuazione quadratica media	44
2.1.4	Divergenza Mermin	45
2.2	Seconda quantizzazione per gli elettroni	46
2.2.1	Scudo di Thomas-Fermi	49
2.3	Interazione elettrone-fonone	52
2.3.1	Resistività dei metalli	56
2.3.2	Modello a diffrazione della resistività	62
2.4	Interazione attrattiva mediata da fononi	63
2.4.1	Interazione elettrone-fonone nello spazio di Fourier	64
3	Coppia di cooper	68
3.1	Quanto è grande la coppia di Cooper?	72
3.2	Seconda quantizzazione per fermioni	72
3.3	Interazioni nella coppia di Cooper	76

3.3.1	Soluzione della coppia di Cooper in seconda quantizzazione	79
3.3.2	Eccitazione di tripletto	82
4	Teoria BCS	85
4.1	BCS Hamiltonian	85
4.1.1	Trasformazione Bogolubou-Valatin	85
4.1.2	Approssimazione di campo medio	90
4.2	Stato fondamentale	91
4.2.1	Coppie nello stato fondamentale	92
4.3	Fluttuazioni del numero di elettroni	95
4.4	Temperatura finita	97
5	Condensazione di Bose-Einstein e Superfluidità	100
5.1	Condensazione di Bose Einstein	101
5.1.1	Statistica di BE per sistema di N atomi	101
5.1.2	Comportamento del condensato	105
5.2	Condensazione di Bose-Einstein nei gas di atomi freddi	107
5.3	Volume escluso	108
5.3.1	Stabilità della fase solida	109
5.4	Quantum Fluid	113
5.5	Superfluidità	114
5.5.1	Teoria quantistica efficace per la Superfluidità	115
5.5.2	Modello a due superfluidi ed eccitazioni	116
5.5.3	Distribuzione del momento	117

Prefazione

Gli appunti raccolti sono frutto delle lezioni del corso “Superconduttività e superfluidità” tenuto del professor Luciano Pietronero, nell’anno accademico 2016-2017 università di Roma “La sapienza”.

Qualunque errore o svista è da imputare all’autore degli appunti, che non ha ancora sottoposto il testo al professore per una sua revisione dei contenuti. Per chiarimenti, segnalazioni o altre comunicazioni è possibile contattarmi all’indirizzo e-mail sottoscritto.

lorenzo.monacelli@roma1.infn.it

Lorenzo Monacelli.

Capitolo 1

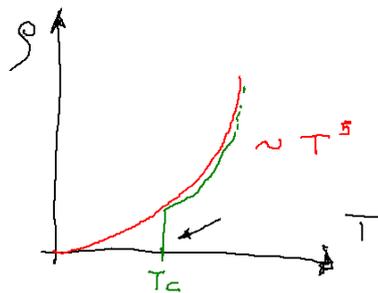
Introduzione

La superconduttività non può essere ottenuta da una sola particella, ecco perché la teoria del liquido di fermi non va bene. In questo caso la coppia diventa l'elemento fondamentale della storia, e deve essere trattata in modo analitico, non perturbativo. Per trattare la superconduttività bisogna usare il formalismo matematico più semplice possibile per le domande che ci si pone.

La teoria BCS è basata sulla seconda quantizzazione, dove c'è il nucleo dell'elemento non perturbativo della super conduttività. Se abbiamo la teoria del liquido di fermi possiamo assumere l'esistenza della coppia e trattare la coppia usando le funzione di fermi. La teoria della superconduttività può essere anche ottenuta usando le funzioni di Green, ma questo è lo stato attuale di lavoro.

1.1 Introduzione storica

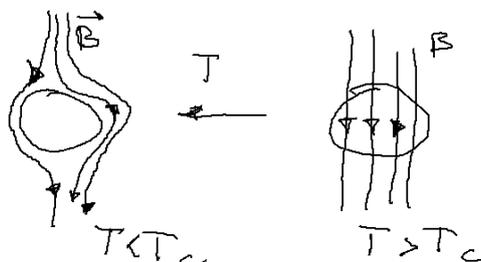
La superconduttività è stata scoperta nel 1911 da Kramer-Omnes. Viene scoperta nel mercurio a temperatura critica a 2 gradi kelvin. Kramer Omnes era un esperto di raffreddamento, voleva studiare come va a zero la resistività dei metalli



Gli elettroni non subiscono più scattering, In realtà questo non è un superconduttore, ma un conduttore ideale. L'altra caratteristica per determinare un superconduttore è l'effetto Misler (espulsione di campo magnetico).

Ogni elettrone si comporta in modo indipendente, il campo magnetico è congelato all'interno, anche se la resistività va a zero.

Quando abbassiamo la temperatura il campo magnetico viene espulso dal campione



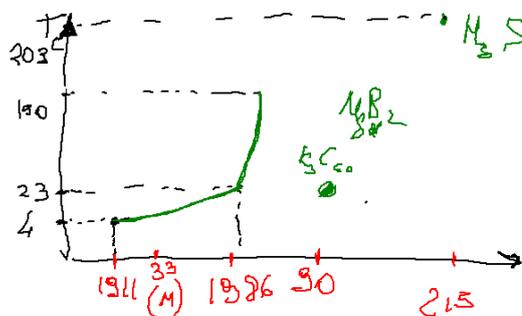
La transizione è vera termodinamica, tipo modello di ising, del secondo ordine.

Fino al 1986 non succede quasi nulla, la temperatura critica aumenta solo fino a 23 gradi, grazie allo sviluppo tecnologico dei materiali. Nel 1957 viene fatta la teoria BCS per spiegare la superconduttività. Nel 1950 c'è la teoria di Ginzburg-Landau e prima abbiamo la teoria di London.

Da questo grafico, lo sviluppo tecnologico se ne frotte altamente della scoperta della teoria, questo perché bastavano le teorie fenomenologiche.

Nel 1986 vengono scoperti i cuprati che arrivano fino a 155 gradi. Questi sono sistemi che per BCS fanno schifo, sono sistemi, Muller autore di questa scoperta è arrivato a questi materiali credendo cose sbagliate.

Oggi siamo 203 gradi per H_3S per sistemi a grande pressione. La superconduttività fu scoperta nel 1911 nel mercurio liquido da Omnes



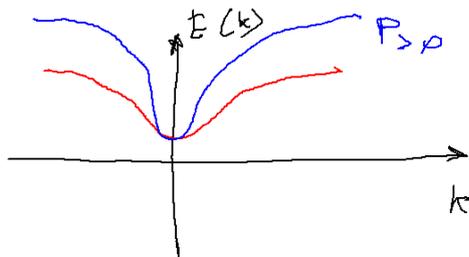
Può sembrare strano che il metallo liquido conduce quasi come un metallo normale. Il teorema di Bloch non vale per un liquido. Un liquido localmente in realtà è abbastanza coordinato, grazie al fatto che ci sono delle forze repulsive che evitano sovrapposizioni e ordinano localmente i metalli.

Nel 33 è stato scoperto l'effetto Maisler, nel 51 è stata fatta la teoria di Ginzburg-Landau. Nel 57 viene la teoria BCS che è la vera spiegazione microscopica della bassa temperatura. La cosa interessante è che il miglioramento empirico dei superconduttori non dipende dalla scoperta teorica della teoria BCS. Nell' 86 vengono scoperti i cuprati.

La copertina di time magazine in quei mesi disse che quella cosa potrebbe eliminare la fame del mondo.

L'energia che si produce si dissipa per almeno il 50 %, c'è un enorme dissipazione, è come scoprire infiniti pozzi di petrolio. L'eccitazione è stata sia tecnologica, sociale e scientifica, la superconduttività normale è già un fenomeno fantastico, figuriamoci questi fenomeni ancora più esotici. Circa un terzo dei fisici teorici hanno lavorato sui cuprati. I teorici sono andati ognuno per la sua strada, sceglie una teoria perché sa fare certi conti. Si va dove si sa andare. Nonostante i migliaia e migliaia di esperimenti, nessuno ha saputo dare informazioni davvero chiare di lettura vera. La situazione è tale che oggi non c'è un consenso su qual è l'origine del high temperature superconduttivity.

Poi sono successe una serie di altre cose nel tempo. Negli anni 90 sono stati scoperti il C_{60} con dei composti che non sembrano buoni rispetto a BCS. Poi abbiamo MgB_2 Tutte cose che vanno oltre il massimo teorico. Nel 2015 accade un nuovo episodio curioso $T_c = 203$ con H_3S che è abbastanza simile all'acqua come molecola. Questo sistema ha un piccolo difetto, che va messo su una pressione bestiale. La pressione è utile, i superconduttori sono tutti metallici, avvicinando i nuclei aumentiamo la dispersione delle bande



La pressione rende tutto un metallo, perché ammazza le bande. Se si guarda la tavola degli elementi, quali sistemi diventano superconduttori e altri no. Sono tanti a diventare superconduttori.

Il rame, l'argento e l'oro, che sono ottimi conduttori non diventano mai superconduttori.

La superconduttività il campo magnetico non gli piace, quindi i candidati magnetici non sono buoni materiali (effetto Meissner).

La persona che aveva fatto la massima ottimizzazione BCS aveva trovato alcune regole empirici.

- Buono avere alta simmetria
- Evitare ossigeno
- Evitare Magnetismo
- Evitare isolanti
- Evitare i teorici

Il motivo di evitare i teorici è molto difficile perché è possibile fare conti approssimativi a decimi di elettron volt (che corrispondono a migliaia di K per la temperatura critica, quindi toppandola completamente). Questo è il motivo per cui è estremamente difficile fare simulazioni computazionali di BCS.

C'era l'idea delle coppie di elettroni, che forza accoppia questi elettroni? Questo è stato chiarito dall'effetto isotopico.

Se prendiamo un atomo di massa M , l'isotopo ha massa M' , ma condividono esattamente le stesse proprietà elettronica. Se osserviamo sperimentalmente che

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

Questo vuol dire che ci devono entrare i fononi. Questa è un'evidenza molto chiara, ma vale solo per sistemi più semplici. Questo da un lato indica qualcosa, ma dall'altro crea un problema. Se guardiamo l'energia di repulsione di due elettroni si respingono con forza

$$U \sim \frac{e^2}{\epsilon_0 r} = 4eV$$

Questa è una forza enorme. Se abbiamo un elettrone questo può polarizzare il reticolo attraendo i nuclei. Questa polarizzazione potrebbe attrarre l'altro elettrone (un po' come se mettiamo due sfere su un materasso, questo si deforma, e le due sfere si attraggono). Tuttavia le energie in gioco non sono neanche lontanamente sufficienti a legare la coppia.

La resistenza zero è incredibile, una corrente in un anello superconduttore sta lì per anni. Probabilmente questo perché è dovuto ad un effetto collettivo e quindi per fare scattering occorre danneggiare un'area molto vasta.

1.2 Campo magnetico in un conduttore ideale

In questa sezione studiamo l'effetto del campo magnetico applicato ad un metallo.

Le equazioni di Maxwell:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \cdot \vec{D} &= \rho_v \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \vec{\nabla} \times \vec{H} &= \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \\ \vec{D} &= \epsilon \vec{E} \quad \vec{B} = \mu \vec{H}\end{aligned}$$

Cominciamo a capire cosa succede se abbiamo un **conduttore ideale**. Abbiamo la legge di Ohm:

$$\vec{J} = \sigma \vec{E}$$

In un conduttore ideale succede che

$$\rho = \sigma^{-1} \rightarrow 0$$

Prendiamo un anello di metallo, sopra T_c ha una certa resistività $\rho \neq 0$, applichiamo un campo magnetico \vec{B}_0 . Supponiamo che a $T < T_c$ il conduttore diventa un conduttore ideale.

Immaginiamo che il nostro sistema sia un anello di conduttore, lo facciamo diventare ideale e togliamo il campo. Viene indotta una corrente che scherma

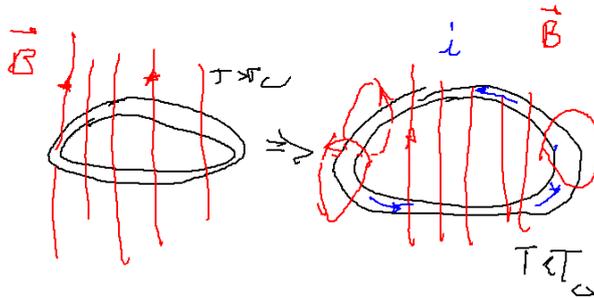


Figura 1.1: Un conduttore ideale tende a mantenere invariato il campo elettrico interno.

esattamente le variazioni del campo magnetico: localmente il campo magnetico rimane lo stesso (legge di Lenz), e si genera una corrente nel conduttore.

Quindi il conduttore ideale **congela** il campo magnetico al suo interno (Figura 1.2, Figura 1.3).

$$\frac{dB}{dt} = 0$$

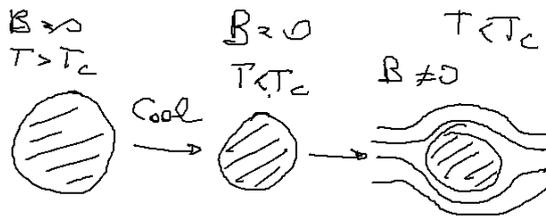


Figura 1.2: Repulsione del campo magnetico da parte di un conduttore ideale: se un conduttore diventa ideale in assenza di campo magnetico interno manterrà l'assenza di campo magnetico, generando un effetto Meissner.

Il superconduttore respinge il campo magnetico interno (Figura 1.4 e Figura 1.5).

$$B = 0$$

La differenza tra conduttore ideale e superconduttore è nel superconduttore $B = 0$, nel conduttore la sua derivata è nulla.

Il superconduttore soddisfa delle condizioni sui campi in più rispetto al normale conduttore ideale. Il metallo ideale congela il campo magnetico all'interno, il superconduttore lo espelle.

Vediamo di ricavare il comportamento del conduttore ideale alla luce delle equazioni di Maxwell: Poiché la transizione di fase superconduttiva è del secondo ordine, si formano delle regioni (simili ai domini di Weiss per le transizioni ferromagnetiche) in cui il materiale è superconduttivo, e delle regioni normali.

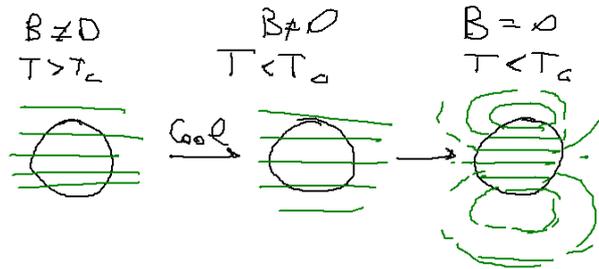


Figura 1.3: Repulsione del campo magnetico da parte di un conduttore ideale: se un conduttore diventa ideale in presenza di campo magnetico, manterrà al proprio interno quel campo magnetico anche in assenza di campo esterno. Questo comportamento non riproduce l'effetto Meissner, ed è la differenza tra superconduttore e conduttore ideale.

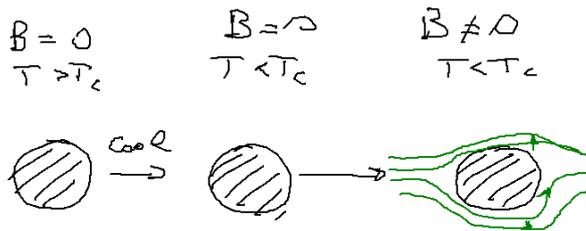


Figura 1.4: Effetto Meissner per i superconduttori in assenza di campo magnetico esterno.

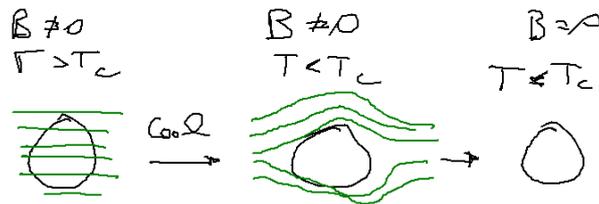


Figura 1.5: Effetto Meissner per i superconduttori in presenza di campo magnetico esterno, differisce dal comportamento di un conduttore ideale (Figura 1.3).

Per gli elettroni normali scriviamo la legge di Ohm:

$$\vec{J} = -n_n r \langle v_n \rangle = \frac{ne^2\tau}{m} \vec{E}$$

Questa è la legge di Drude. Nella parte superconduttiva gli elettroni non fanno scattering: $\tau \rightarrow \infty$. La legge di Drude infatti è di diffusione, l'elettrone superconduttivo è libero, e accelera in presenza di un campo elettrico:

$$m \frac{dv_s}{dt} = eE \quad \frac{\partial \vec{J}_s}{\partial t} = \frac{ne^2}{m} \vec{E}$$

Quindi c'è una grande differenza tra le due leggi.

Perché ce ne possiamo fregare degli elettroni normali? Perché se non abbiamo campo elettrico la corrente normale è nulla, e rimane solo la corrente superconduttiva.

Vediamo il come è il campo magnetico in un conduttore ideale.

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

Usando la relazione del conduttore ideale (n_{pc} è il numero di elettroni nella fase di conduttore ideale):

$$\vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{J}_s}{\partial t} = -\frac{n_{pc}e^2}{m} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

Ora scriviamo l'equazione di Ampere-Maxwell.

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{J}$$

Mettiamoci in condizioni semi-stazionarie, e in un materiale non ferromagnetico:

$$\mu_r \sim 1 \quad \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \approx 0$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}_{pc}$$

$$\vec{\nabla} \times \left(\vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) = -\frac{\mu_0 n_{pc} e^2}{m} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

Ricordando che:

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}$$

Grazie alla seconda legge di Maxwell otteniamo:

$$\nabla^2 \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \frac{\mu_0 n_{pc} e^2}{m} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.1)$$

Questa è un'equazione che ci dice come varia nello spazio e nel tempo il campo magnetico in un conduttore ideale. Studiamo un esempio semplice. Prendiamo un cilindro, con assi orientati come mostrato in Figura 1.6.

Fuori del conduttore abbiamo un campo magnetico uniforme:

$$\vec{B} = B_0 \hat{x}$$

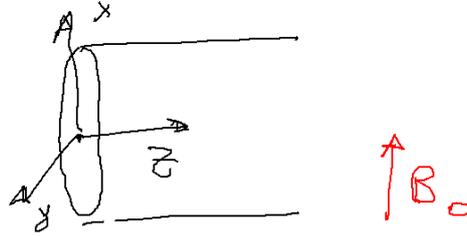


Figura 1.6: Cilindro di conduttore ideale.

Scriviamo l'equazione 1.1 lungo l'asse z interna al cilindro:

$$\frac{\partial}{\partial z^2} \left(\frac{\partial B_x(z, t)}{\partial t} \right) = \frac{1}{\lambda_{pc}^2} \frac{\partial B_x(z, t)}{\partial t}$$

Da cui λ_{pc} è la lunghezza di penetrazione

$$\frac{1}{\lambda_{pc}^2} = \frac{\mu_0 n_{pc} e^2}{m}$$

La soluzione generale è

$$\frac{\partial B_x(z, t)}{\partial t} = a(t)e^{-z/\lambda_{pc}} + b(t)e^{z/\lambda_{pc}}$$

Per avere una soluzione fisica il campo magnetico deve annullarsi a $z \rightarrow \infty$:

$$b(t) = 0 \quad a(t=0) = \frac{\partial B_0}{\partial t}$$

Da cui troviamo:

$$\frac{\partial B_x(z, t)}{\partial t} = \frac{\partial B_0(t)}{\partial t} e^{-z/\lambda_{pc}}$$

Il campo non viene espulso, ma è il cambio che viene vietato all'interno del materiale. Ossia per $z \gg \lambda_{pc}$ si ha

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0$$

Questa è la dimostrazione generale del fatto che nei conduttori ideali non generano effetto Meissner ($\vec{B} = 0$), ma generano un congelamento del campo magnetico.

1.3 Equazioni di London

Il conduttore ideale non è in grado di spiegare l'effetto Meissner: le condizioni sul campo magnetico sono:

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0$$

L'effetto Meissner è invece ottenuto dalla condizione:

$$\vec{B} = 0$$

L'equazione del campo magnetico in un conduttore perfetto vale (per $\vec{E} = 0$):

$$\vec{\nabla} \times \left(\frac{\partial \vec{J}_{pc}}{\partial t} \right) = -\frac{n_{pc}e^2}{m} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0$$

London, per risolvere questo problema, toglie empiricamente le derivate da questa equazione, ottenendo una relazione empirica per il superconduttore:

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \times \vec{J}_s = -\frac{n_s e^2}{m} \vec{B} \\ \frac{\partial \vec{J}_s}{\partial t} = \frac{n_s e^2}{m} \vec{E} \end{cases} \quad (1.2)$$

La seconda legge è l'equivalente della legge di Newton $F = ma$.

Le equazioni di London (1.2) non sono una modifica alle leggi di Maxwell, ma impongono una condizione integrale sul campo magnetico, quindi stiamo dando un'informazione specifica su come il campo magnetico interagisce con gli elettroni. Questi elettroni sono strani, e invece di regire sulla banda di dispersione hanno proprietà diverse, come se si aprisse una *gap* che congela alcuni gradi di libertà (Figura 1.7).

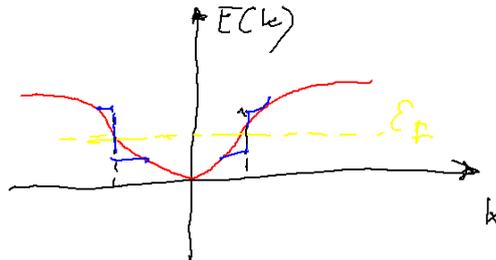


Figura 1.7: In rosso la banda di dispersione del metallo, la condizione di London equivale ad aprire una *gap* attorno al livello di Fermi.

Questa *gap* modifica la risposta del sistema al campo magnetico. London tuttavia ha fatto una descrizione empirica, poiché di questa interpretazione non ne sapeva nulla.

Le equazioni di London sono un analogo della legge di Ohm, un'ipotesi di lavoro sullo stato superconduttivo senza conoscere la teoria microscopica (Ohm, infatti, non conosceva la teoria di Drude sullo scattering).

Usiamo le equazioni di Maxwell per ricavare ora il comportamento del campo magnetico dalle equazioni di London.

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}_s$$

Applichiamo un altro rotore e sostituiamo nelle equazioni 1.2:

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{B} = -\frac{\mu_0 n_s e^2}{m} \vec{B} = -\frac{1}{\lambda^2} \vec{B}$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 n_s e^2}}$$

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

Se scriviamo queste equazioni all'interfaccia tra un superconduttore e il vuoto (Figura 1.8) possiamo risolvere le equazioni:

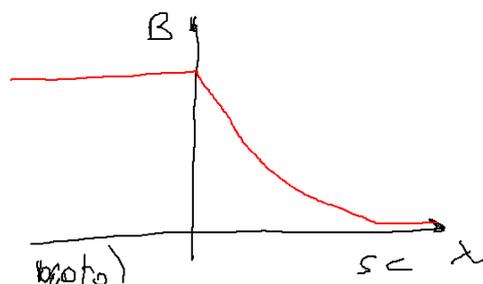


Figura 1.8: Campo magnetico in funzione della posizione. Sulle ascisse positive è presente un superconduttore (il campo penetra una lunghezza λ), sulle ascisse negative c'è il vuoto.

$$\vec{B}_x(z) = \vec{B}_0 e^{-z/\lambda} \quad (1.3)$$

Quindi il superconduttore scherma il campo magnetico. Esiste un valore critico del campo magnetico oltre il quale questo riesce a rompere lo stato superconduttivo.

Questo campo critico dipende dalla temperatura, come mostrato in Figura 1.9.

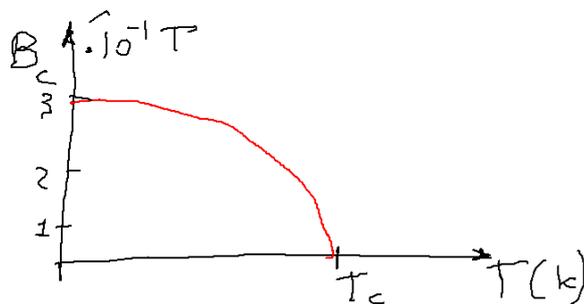


Figura 1.9: Andamento del campo magnetico critico in funzione della temperatura.

All'aumentare della temperatura costa sempre meno distruggere il superconduttore. Un buon fit delle curve è ottenuto dalla relazione:

$$B_c(T) = B_0 \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right]$$

Questa è una tipica transizione del secondo ordine. Nella Tabella 1.1 sono riportati temperatura e campo magnetico critico massimo per alcuni più comuni superconduttori BCS.

	T_c [k]	$B_c(0)$ [mT]
Al	1.2	10
Cd	0.52	28
Hg	4.2	41

Tabella 1.1: Tabella sui superconduttori.

1.3.1 Diamagnetismo nei superconduttori

I metalli normali possono essere paramagnetici, ferromagnetico e diamagnetico.

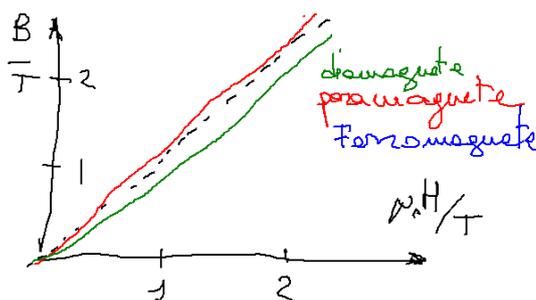


Figura 1.10: Schema di comportamento dei diamagneti tradizionali.

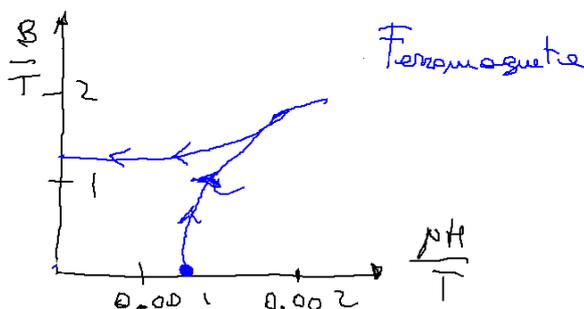


Figura 1.11: Schema di comportamento dei ferromagneti (isteresi).

L'enorme differenza tra il ferromagnete e gli altri è l'interazione tra gli spin: basta un piccolo campo per polarizzare un sacco il materiale. Nei sistemi ferromagnetici abbiamo il fenomeno dell'isteresi, che è assente nei superconduttori

perché abbiamo una transizione del secondo ordine (la transizione ferromagnetica è del primo ordine, appartiene al punto critico). Le transizioni del primo ordine non hanno elementi essenziali, mentre le transizioni critiche del secondo ordine hanno una classe del tutto generale. La superconduttività rientra tra le transizioni generali.

Gli esponenti critici sono fondamentali, perché non si possono fare espansioni di Taylor, non c'è nessuna zona che è espandibile. I fenomeni critici non si possono descrivere con equazioni differenziali ordinarie. Il sistema è invariante di scala, questa invarianza di scala comporta il fatto che sia non analitico. Il non analitico vuol dire che il sistema è frattale, ossia composto da strutture via via più complesse. Se si prende un problema di questo tipo non si trova una matematica che si descrive, perché non si possono fare derivate, perché la funzione non è mai derivabile.

Il metodo che ha risolto tutto è il gruppo di rinormalizzazione: un tentativo disperato di ritrovare la regolarità. Nel gruppo di rinormalizzazione si definisce una nuova variabile, la trasformazione di scala, per cui il sistema è regolare.

Il comportamento magnetico in un superconduttore è riportato in Figura 1.12

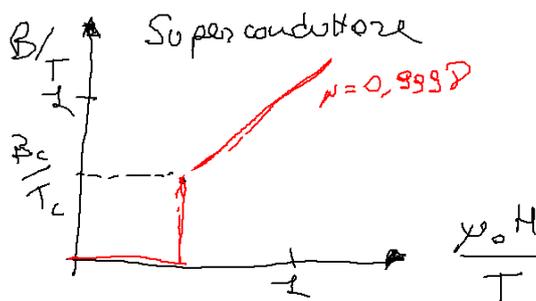


Figura 1.12: Comportamento fortemente diamagnetico nel superconduttore. Notare la differenza tra il diamagnete tradizionale (Figura 1.10) e quello superconduttore, che annulla completamente il campo interno.

Il premio nobel di quest'anno (2016) è dovuto al fatto che hanno dimostrato che in due dimensioni sono possibili transizioni critiche. Se abbiamo un'interazione a primi vicini con parametro continuo tra i due (tipo Ising ma con spin ruotabili continui), Mermin e Wagner hanno dimostrato che non è possibile avere alcun ordine di transizioni in una o due dimensioni. Questo è critico perché anche le vibrazioni possono mapparsi in questi problemi, quindi non possono aversi sistemi solidi a una o due dimensioni.

In realtà il premio nobel è dovuto al lavoro teorico che ha spiegato come possono vedersi queste transizioni. Possiamo comunque definire un nuovo parametro d'ordine locale come la correlazione tra due siti, in questo modello dimostra che si può avere un altro tipo di transizione in cui c'è un ordine locale (gli spin) che fluttuano all'infinito, mentre il parametro d'ordine non locale (come la correlazione) è finito e ha una transizione di fase.

1.3.2 Corrente critica

Anche la corrente che attraversa il superconduttore deve avere un valore critico, infatti una corrente che attraversa il superconduttore induce un campo magnetico. Se il campo magnetico indotto all'interno del superconduttore è maggiore del campo critico, il superconduttore cessa di esistere:

$$I_C = \frac{2\pi a B_c}{\mu_0}$$

Quindi non possiamo far passare troppa corrente, per le applicazioni pratiche si usa tipicamente:

$$T \sim \frac{T_c}{2} \quad I_c \sim 0.75 I_c^{max}$$

In realtà in un superconduttore la corrente non fluisce in tutto il sistema, ma solo in un piccolo strato vicino alla superficie, perché questo schermo tutti i campi esterni.

Lo spessore di questo strato è esattamente λ (come per il campo magnetico):

$$\lambda = \left(\frac{m}{\mu_0 n_s e^2} \right)^{\frac{1}{2}} = 1.7 \cdot 10^{-8} \text{ m} \approx 20 \text{ nm}$$

L'altra lunghezza che introdurremo è la lunghezza di coerenza (che chiameremo ξ)

La lunghezza di penetrazione è circa 200 atomi. È piccola rispetto alla scala macroscopica, ma del tutto apprezzabile in scala atomica.

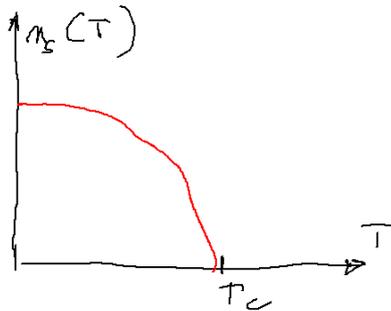


Figura 1.13: Andamento del numero di elettroni superconduttivi al variare della temperatura.

Una formula di interpolazione per l'andamento di λ in temperatura (Figura 1.14) è il seguente:

$$\lambda(T) = \frac{\lambda(0)}{\sqrt{1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^4}}$$

1.3.3 Corrente di screening

Le equazioni di London possono essere usate per ricavare le correnti di screening nei superconduttori. Adesso eliminiamo B dalle equazioni di London (1.2) e

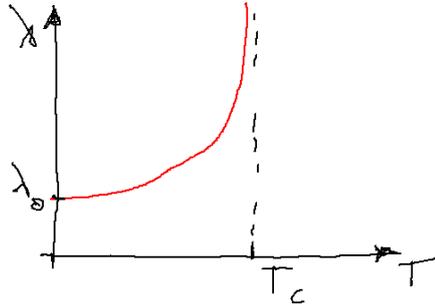


Figura 1.14: Andamento della lunghezza di penetrazione magnetica al variare della temperatura.

ricaviamo \vec{J}_s (oppure sostituiamo la soluzione di \vec{B} dentro l'equazione di \vec{J}_s), e otteniamo:

$$\nabla^2 \vec{J}_s = \frac{1}{\lambda^2} \vec{J}_s$$

Quindi anche la corrente decade con un esponenziale con lunghezza di penetrazione pari a λ

$$J_s(z) = J_0 e^{-z/\lambda}$$

Questo può essere ricavato facilmente:

$$\vec{B} = B_x(z) \hat{x}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{\partial B_x(z)}{\partial z} \hat{y} = \mu_0 \vec{J}$$

$$\vec{J}_s = \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial B_x(z)}{\partial z} \hat{y} = J_s(z) \hat{y}$$

Usando la soluzione per il campo magnetico (1.3):

$$B_x(z) = B_0 e^{-z/\lambda}$$

Ricaviamo l'equazione per la corrente:

$$J_s(z) = -\frac{B_0}{\mu_0 \lambda} e^{-z/\lambda}$$

La situazione tipica è mostrata in Figura 1.15.

In questo caso abbiamo una relazione locale tra campo e \vec{J} . In realtà esiste un'altra grandezza intrinseca, la lunghezza di coerenza. Se $\xi \ll \lambda$ allora la trattazione di London è corretta, se $\xi \sim \lambda$ o $\xi > \lambda$ allora questa trattazione locale non è più soddisfatta e la teoria di London non porta a risultati accurati.

1.3.4 Disomogeneità indotta e intrinseca

I superconduttori possono essere di due tipi molto diversi tra loro. È facile pensare che questa descrizione abbia dei problemi concettuali. Prendiamo un campo trasversale al cilindro (Figura 1.16).

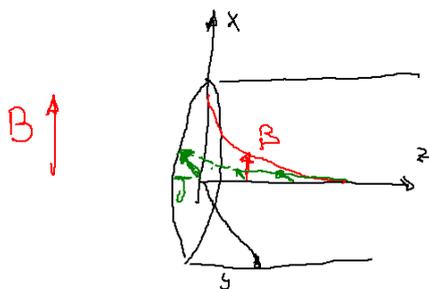


Figura 1.15: Andamento della corrente e del campo nei superconduttori.

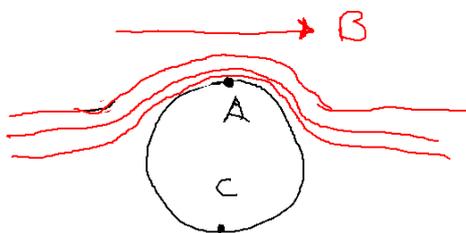


Figura 1.16: Superconduttore soggetto a campo magnetico esterno.

Si può dimostrare che

$$B_a = 2B_0$$

Quindi sembrerebbe che il campo critico si dimezzi. Supponiamo che il campo esterno valga la metà del campo critico

$$B_0 = \frac{B_c}{2}$$

Sul superconduttore, nel punto A agisce un campo pari:

$$B_a = 2B_0 = B_c$$

Quindi si raggiunge il campo critico e la superconduttività si spezza, portando il campo esterno B_0 all'interno del neo-metallo.

Tuttavia ora $B_0 < B_c$, per cui il sistema è sotto la temperatura critica e si riforma lo stato superconduttivo (e così via all'infinito).

Quello che avviene è una rottura di simmetria, si creano zone superconduttive alternate a zone non superconduttive (Figura 1.17)

Questi sistemi portano a condizioni in cui non c'è più omogeneità tra zone superconduttori o non superconduttori. Questo avviene anche in superconduttori di Tipo I (omogenei). Quindi l'omogeneità può essere rotta da particolari geometrie del campo elettromagnetico.

Il superconduttore di Tipo II è un superconduttore in cui ξ domina rispetto a λ . ξ rappresenta la distanza di a cui il numero di elettroni superconduttori si

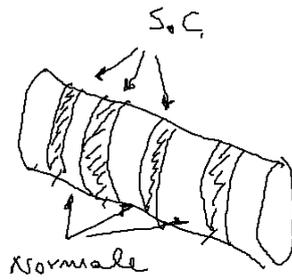


Figura 1.17: Rottura della simmetria in un superconduttore di tipo I.

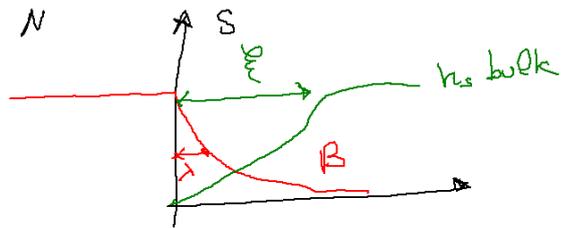


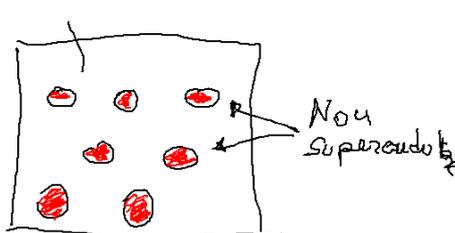
Figura 1.18: Penetrazione nel superconduttore del campo magnetico (rosso), e numero di elettroni superconduttivi (verde). A queste due curve sono legate le due distanze caratteristiche dei superconduttori, rispettivamente λ e ξ .

stabilizza. Nei superconduttori di tipo II il superconduttore crea automaticamente instabilità e rottura di simmetria, e hanno una intrinseca disomogeneità. La non omogeneità è stata scoperta da Aprikosof nel '57 con la teoria di Landau-Ginzburg (ci ha vinto il premio Nobel). I superconduttori di tipo II proprio a causa dell'inomogeneità sono molto più resistenti al campo magnetici, quindi resiste a campi magnetici molto intensi. La località delle equazioni di London vuol dire che se mettiamo un campo elettrico \vec{E} in un punto il sistema reagisce con una corrente \vec{J} esattamente in quel punto. In realtà questo non è esatto nel sistema. La non località è misurata dalla lunghezza di coerenza ξ .

1.4 Superconduttori di Tipo II

Se abbiamo una rottura di simmetria dobbiamo verificare se mi conviene creare delle superfici tra stati superconduttivi e stati normali. Questo dà luogo a superconduttori di tipo II, intrinsecamente disomogenei.

Nel '57 Abrikosov risolse le equazioni di Landau-Ginzburg e vide che esistevano soluzioni non omogenee. Landau gli disse che era una scemenza. Poi in realtà Abrikosov ci ha vinto il Nobel. Il sistema di suo ha una instabilità, o rottura spontanea di simmetria che porta a disomogeneità, e in un reticolo triangolare si generano i *flussoni* (zone di metallo normale permeabili al campo magnetico).



Questi materiali qui sono importanti dal lato tecnologico, perché resistono a campi magnetici più intensi.

Sotto un certo campo che chiamiamo B_{c1} abbiamo un superconduttore normale, tra B_{c1} e B_{c2} abbiamo una rottura di simmetria, e sopra B_{c2} il sistema diventa metallico.

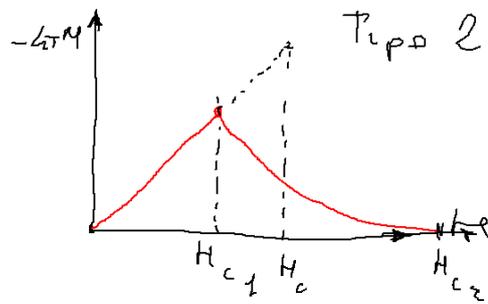
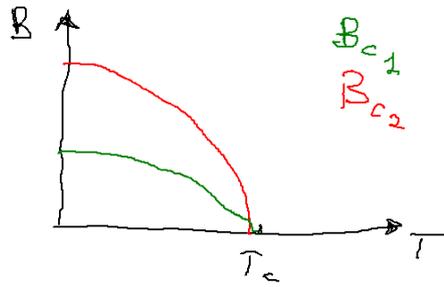
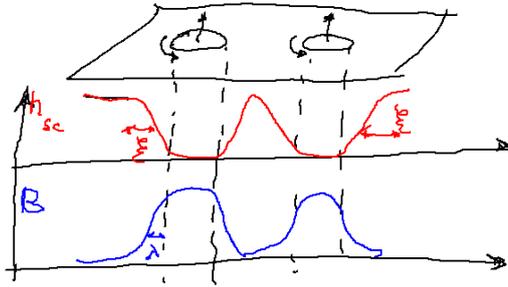
Passando il campo magnetico si generano delle correnti nei flussoni:

Quanto può essere il flusso dentro i flussoni? Il flusso magnetico (e quindi la corrente) è quantizzato:

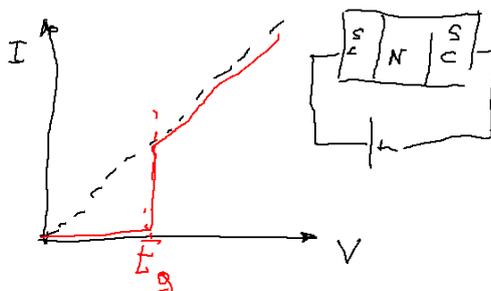
$$\frac{\hbar}{2e} = 2.07 \cdot 10^{-15} \text{ Tm}^2 \quad (1.4)$$

Questa legge è una dimostrazione dell'esistenza delle coppie di Cooper (grazie al $2e$ al denominatore).

Questi oggetti sono estremamente sensibili al campo magnetico, perché devono cambiare in modo quantizzato e discreto.



Nei superconduttori di tipo due dopo H_{c1} si creano le disomogeneità, i flussoni, che aumentano di densità. Se abbiamo una giunzione tra superconduttore e conduttore normale abbiamo una fenomenologia caratteristica. Infatti per passare un elettrone da superconduttore a conduttore dobbiamo rompere la coppia di Cooper, e questo corrisponde a dare alla coppia un'energia pari alla gap



Se abbiamo una gap come fa il sistema a condurre? Perché non è un isolante? In realtà gli elettroni si legano e formano un bosone, nello spazio dei bosoni non c'è una gap. La coppia si può muovere senza gap. L'elettrone singolo ha una gap, mentre la coppia no. Questo è il motivo per cui il superconduttore per condurre a contatto con un metallo tradizionale deve condurre ad un solo elettrone, e quindi abbiamo nessuna corrente per V piccolo (minore della gap).

1.5 Campo magnetico quantistico

Partiamo dall'equazione di Maxwell:

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\epsilon}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{4\pi\sigma}{c} \vec{E}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\mu}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \rho_v$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$$

Si introducono due grandezze U e ϕ :

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

La forza di Lorentz:

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

Definiamo l'azione della Lagrangiana:

$$S[q] = \int dt L(q, \dot{q})$$

Applichiamo il principio di Hamilton:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

Da cui si ricava l'hamiltoniana del campo elettromagnetico:

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi$$

Questa hamiltoniana è ottenuta sostituendo a $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - q\vec{A}$. Questa scrittura è molto comoda. La gauge è una specie di fase nella funzione d'onda, questa fase non è un osservabile. Però la funzione d'onda non riguarda un elettrone ma un condensato, quindi la fase del condensato è molto più rilevante (lo vedremo nell'effetto Josepson). La fase di un condensato gioca un ruolo fisico.

1.5.1 Quantizzazione del campo

In meccanica quantistica l'operatore momento è definito dalle identità:

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

Se consideriamo la radiazione elettromagnetica, a causa della forza di Lorentz, dobbiamo reinterpretare questa formula:

$$\hat{p}_i \neq m\hat{v}_i$$

La situazione è più complessa:

$$m\hat{v}_i = -i\hbar\partial_{x_i} - q\hat{A}_i$$

Da cui otteniamo

$$[\hat{v}_x, \hat{v}_y] = \frac{i\hbar q}{m^2} B$$

L'hamiltoniana del campo elettromagnetica può essere ottenuta da quella tradizionale con la sostituzione minimale

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - qA$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} [\hat{p} - qA(r, t)]^2 + q\phi(r, t)$$

Questa hamiltoniana possiede un'invarianza di gauge, definita dal fatto che il potenziale vettore e il potenziale scalare ϕ definiscono campo elettrico e magnetico in modo non univoco:

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

Supponiamo che

$$\vec{A} = \vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} + \vec{\nabla} \times \vec{\nabla}\Lambda = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

Questa trasformazione cambia \vec{E} :

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \partial_t A - \vec{\nabla}\partial_t\Lambda$$

Se trasformo anche ϕ otteniamo l'invarianza:

$$\phi \rightarrow \phi - \partial_t \Lambda \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \Lambda$$

L'invarianza per Λ è l'invarianza di Gauge, detta anche invarianza di tipo $U(1)$. La superconduttività si forma dall'esistenza di uno stato quantistico coerente; le coppie cariche formano un campo (bosonico) che condensa in uno stato fondamentale di ampiezza macroscopica:

$$n_b = |\psi|^2$$

Questa ψ ha una fase e possiamo usarla in una equazione di Schroedinger:

$$\frac{1}{2m_b} \left(-i\hbar \vec{\nabla} - q\vec{A} \right)^2 \psi + qU\psi = (\mathcal{E} - \mu_b)\psi \quad (1.5)$$

Dove il campo totale ϕ è pari al campo locale μ_b (potenziale chimico, energia del sistema in assenza di campo esterno) più l'energia dovuta al campo esterno U :

$$\phi = \mu_b + qU$$

U è il potenziale esterno. Il campo elettrico efficace agente sulle particelle è definito:

$$E_{eff} = -\partial_t A - \frac{1}{q} \frac{\partial \phi}{\partial r} \quad (1.6)$$

La corrente elettrica può essere calcolata a partire dal momento coniugato:

$$-i\hbar \partial_r \quad \text{Momento canonico}$$

$$\hat{p}_m = -i\hbar \partial_r - qA \quad \text{Momento meccanico}$$

La corrente del campo bosonico sarà pari alla parte reale dell'operatore corrente:

$$J_B = q \frac{p_m}{m_B} n_B = \frac{q}{m_b} \Re(\psi^* \hat{p}_m \psi)$$

$$J_B = -\frac{iq\hbar}{2m_b} (\psi^* \partial_r \psi - \psi \partial_r \psi^*) - \frac{q^2}{m_b} \psi^* \psi A$$

Il primo termine è la corrente paramagnetica, mentre la seconda è diamagnetica (in realtà questo dipende dalla scelta di gauge). La funzione d'onda sarà fatta da:

$$\psi(r, t) = \sqrt{n_b} e^{i\theta(r, t)}$$

Sostituendo questa funzione nella formula della corrente otteniamo:

$$J_B = -\frac{iq\hbar n_b}{2m_b} [i\partial_r \theta + i\partial_r \theta] - \frac{q^2 n_b}{m_b} A$$

$$\frac{m_b}{n_b q^2} J_B = \frac{\hbar}{q} \partial_r \theta - A$$

$$\Lambda J_B = \frac{\hbar}{q} \partial_r \theta - A \quad \Lambda = \frac{m_b}{n_b q^2} \quad (1.7)$$

Nello stato fondamentale vale

$$\mathcal{E} = \phi \quad \mathcal{E}\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Il limite del modello di London suppone che $\xi = 0$:

$$n_b = \text{const}$$

Da cui l'equazione di Schroedinger diventa:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}\sqrt{n_b}e^{i\theta} &= -\hbar \frac{\partial\theta}{\partial t}\sqrt{n_b}e^{i\theta} \\ \hbar \frac{\partial\theta}{\partial t} &= -\phi \end{aligned}$$

Deriviamo l'equazione (1.7) rispetto al tempo e sostituiamo questo risultato al suo interno:

$$\partial_t(\Lambda J_s) = -\partial_t A - \frac{1}{q}\partial_r \left(\hbar \frac{\partial\theta}{\partial t} \right) = -\partial_t A - \frac{1}{q}\partial_r \phi$$

Riconosciamo l'espressione del campo efficace (1.6), che se sostituita diventa la prima equazione di London quantistica.

$$\partial_t(\Lambda J_s) = E_{eff} \tag{1.8}$$

Che è la versione quantistica della legge di Newton. La funzione d'onda che abbiamo scritto rappresenta il condensato bosonico. Abbiamo assunto che tutte le nostre particelle stessero sullo stato fondamentale ($\mathcal{E} = \mu_b + qU$), questo è possibile solo se sono dei bosoni.

In pratica stiamo aggiungendo una fase alle particelle, permettendo loro di interferire; questa è l'approssimazione *semiclassica*¹

La densità del campo bosonico è una funzione d'onda:

$$n_b = |\psi|^2$$

Una caratteristica interessante di questo sistema è data dal fatto che la fase θ rappresenta un osservabile fisico, tanto da dar luogo all'effetto Josephson (vedi più avanti):

$$\psi(r, t) = \sqrt{n_b}e^{i\theta(r, t)}$$

q e m_b sono carica e massa del bosone elementare (la coppia). Nello stato fondamentale

$$\mathcal{E} = \phi$$

Perché è l'energia minima che il sistema può avere (μ_b energia dell'atomo a riposo più l'energia del campo esterno qU). La prima legge di London è un po' più sofisticata della legge di Newton:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Lambda J_s) = E_{eff}$$

¹ L'approssimazione semiclassica è che le traiettorie sono uguali a quelle Newtoniane ma ci si aggiunge una fase alle traiettorie.

La seconda legge di London può essere ottenuta direttamente applicando il rotore a (1.7):

$$\nabla \times (\Lambda J_s) = \nabla \times \left[\left(\frac{\hbar}{q} \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) - A \right]$$

$$\nabla \times \nabla \theta = 0 \quad B = \nabla \times A$$

Da cui arriviamo alla seconda equazione di London:

$$\nabla \times (\Lambda J_s) = -B \quad (1.9)$$

In questa derivazione quantistica delle equazioni di London non è stato necessario eliminare *ad hoc* la derivata temporale nelle equazioni di Maxwell. L'ipotesi bosonica mi permette di dire che tutti i conduttori sono nello stato fondamentale, e da questo segue direttamente l'equazione di London. Questo perché l'assunzione di una funzione d'onda bosonica si porta dietro informazioni microscopiche maggiori rispetto alla trattazione classica delle equazioni di Maxwell, fornendo, di fatto, la costante di integrazione.

1.6 Lunghezza di coerenza

Esistono due lunghezze, la lunghezza di penetrazione λ , di natura puramente classica (eq. di London), e la lunghezza di coerenza (quantistica) che si indica con ξ .

Il processo che porta alla definizione della lunghezza di coerenza è simile allo scudo di Thomas-Fermi.

Immaginiamo di avere un impurezza carica positivamente all'interno di un metallo. Per il principio di Faraday il campo elettrico in un metallo elettrostatico deve essere nullo, altrimenti gli elettroni, liberi di muoversi, risentono di questo campo.

In realtà gli elettroni in un metallo sono tutt'altro che liberi, ma devono rispettare il principio di esclusione di Pauli, pertanto non tutti gli stati sono loro accessibili. Quello che avviene quindi è che la carica in eccesso non viene annullata completamente, perché la modulazione di carica che introduce costa energia al sistema (perché gli elettroni devono occupare stati di più alta energia).

Questo si vede facilmente in spazio degli impulsi. Supponiamo di avere una carica puntiforme dentro il conduttore. Per essere completamente schermata basta che gli elettroni si dispongono su una delta di Dirac:

$$\rho = \rho_0 \delta(r - r_0)$$

In spazio k la funzione di densità elettronica è una costante (trasformata della delta), quindi dobbiamo avere elettroni ad ogni k . Poiché la curva di dispersione degli elettroni è parabolica:

$$\mathcal{E}_{kin} \propto k^2$$

Mettere elettroni a grande k ha un enorme costo in energia. Quello che avviene è che gli elettroni moduleranno solo fino ad un certo k che bilancia l'energia guadagnata dalla presenza dell'impurezza (quindi il campo non sarà completamente schermato²).

²L'effetto gabbia di Faraday è un caso particolare, poiché è il limite di campo statico (bassi k), per il quale la modulazione introdotta non costa energia.

La lunghezza di coerenza è la stessa cosa per la superconduttività: le modulazioni della funzione d'onda bosonica non possono avere una lunghezza troppo corta (al quale corrisponde un k alto), altrimenti il costo di energia per permettere queste modulazioni supera l'energia della gap elettronica, e rompe la coppia di Cooper.

La lunghezza di coerenza è la lunghezza minima di modulazione al di sotto della quale il costo di energia distrugge lo stato superconduttivo. Questa è una grandezza che ha un'origine prettamente quantistica.

Valutiamo il costo energetico di una modulazione. Per farlo calcoliamo l'energia di una funzione d'onda non modulata (onda piana) e quello di una di una con modulazione $2\pi/q$:

$$\psi(x) = e^{ikx} \quad |\psi(x)|^2 = 1$$

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{i(k+q)x} + e^{ikx} \right) \quad |\varphi(x)|^2 = 1 - \cos(qx)$$

La seconda uguaglianza è banale da verificare:

$$\varphi^* \varphi = \frac{1}{2} \left(e^{-i(k+q)x} - e^{-ikx} \right) \left(e^{i(k+q)x} - e^{ikx} \right) = \frac{1}{2} (2 - e^{iqx} - e^{-iqx}) = 1 - \cos(qx)$$

Calcoliamo l'energia (nel modello a elettrone libero)

$$K[\psi(x)] = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Per il secondo caso l'energia cinetica è

$$K[\varphi(x)] = \int dx \varphi^* \left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \varphi = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) [(k+q)^2 + k^2]$$

$$K[\varphi(x)] \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} kq + O(q^2) \quad q \ll k$$

Quindi modulare di un vettore d'onda q ha un costo di energia pari a:

$$\Delta K = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} kq - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\Delta K = \frac{\hbar^2}{2m} k_f q$$

Dove k_f è il vettore d'onda di Fermi. Questo costo deve essere minore dell'energia della gap:

$$\frac{\hbar^2 k_f q}{2m} > E_g$$

Se la modulazione costa più energia della gap vuol dire che lo stato non condensa. Il punto chiave è il principio di Pauli, perché addensare elettroni costa un'energia parabolica. La massima modulazione che un superconduttore può accettare è:

$$q_0 < \frac{2mE_g}{\hbar^2 k_f}$$

Da cui ricaviamo la lunghezza superconduttiva:

$$\xi_0 = \frac{1}{q_0} = \frac{\hbar^2 k_f}{2mE_g} = \frac{\hbar v_f}{2E_g}$$

Dove abbiamo scritto la velocità di fermi:

$$v_f = \frac{\hbar k_f}{m}$$

Invece la lunghezza di penetrazione di London valeva:

$$\lambda_L = \left(\frac{m}{\mu_0 n e^2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

In generale $\xi > \lambda_L$, anche se dipendono fortemente dal materiale, e di solito sono dello stesso ordine di grandezza.

$$\xi \approx 10^{-6} \text{ cm}$$

Il fatto che la lunghezza di coerenza sia maggiore della lunghezza di penetrazione ci dice che gli argomenti alla base della teoria di London non sono corretti, è una teoria numericamente sbagliata. Nella realtà queste lunghezze dipendono in modo molto importante dalle impurezze (cammino libero medio degli elettroni).

1.7 Quantizzazione del flusso in un anello superconduttivo

Immaginiamo di avere un anello di materiale superconduttore (Figura 1.19).

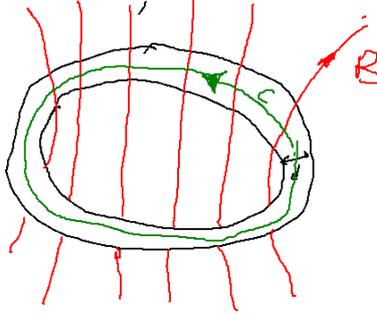


Figura 1.19: Anello superconduttore attraversato da delle linee di flusso magnetico. Il bordo dell'anello si assume sufficientemente spesso in modo da poter scegliere un contorno c interno al superconduttore tale che non vi sia né corrente, né campo elettrico, né campo magnetico ($d \gg \lambda$).

Prendiamo un contorno c all'interno di un super conduttore tale che $d \gg \lambda$ così che:

$$J_s = 0 \quad E = 0 \quad B = 0$$

Usiamo la legge di Faraday:

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t}$$

Calcoliamo il flusso del campo magnetico che passa attraverso una superficie definita dal contorno di c :

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{A(c)} B ds = - \oint_c E \cdot dl = 0$$

Quindi il flusso è rimane sempre costante. Anche se le supercorrenti cambiano con il tempo, il flusso Φ all'interno di un superconduttore viene intrappolato, e rimane costante.

Integriamo sul contorno c la prima legge di London quantistica (1.8):

$$\Lambda J_s = \frac{\hbar}{q} \frac{\partial \theta}{\partial r} - A$$

$$\oint_c (A + \Lambda J_s) \cdot dl = \frac{\hbar}{q} \underbrace{\oint_c \frac{\partial \theta}{\partial r} \cdot dl}_{\theta(R_0, 0) - \theta(R_0, 2\pi)}$$

Ora l'angolo integrato sul circuito è la differenza di θ se facciamo un giro. Poiché θ è la fase della funzione d'onda, quando compiamo un giro la funzione d'onda deve essere uguale a se stessa, e la fase deve essere cambiata di un multiplo intero di 2π . Questo porta alla quantizzazione del *flussoide*:

$$\oint_c (A + \Lambda J_s) \cdot dl = \frac{\hbar}{q} 2\pi n \quad (1.10)$$

Il termine a sinistra dell'integrale è detto *flussoide* di London. Se $d \gg \lambda$ la corrente interna al superconduttore è nulla, pertanto il flussoide è proprio uguale al flusso del campo magnetico:

$$\oint_c A \cdot dl = \int_{S(c)} \nabla \times A dS = \int_{S(c)} B dS = \Phi$$

Quindi solo se $d \gg \lambda$ il flusso del campo magnetico è quantizzato. Il quanto di flusso magnetico è detto *flussone*:

$$\Phi = \frac{\hbar}{q} 2\pi n$$

Attenzione: il *flussoide* (1.10) è sempre quantizzato, il flusso, invece, è quantizzato solo se J_s è nullo (e quindi flusso e flussoide si equivalgono).

Il quanto di flusso può essere misurato sperimentalmente e si ottiene:

$$|q| = 2e \quad \Phi_0 = \frac{h}{2e}$$

Questo ci dimostra che il portatore di corrente nei superconduttori ha carica pari a $2e$. Questo lascia col problema della determinazione del segno della carica, infatti questo processo ci da soltanto la distanza tra due quanti di flusso, non il segno assoluto (poiché il sistema è simmetrico per inversione di parità). Per scoprire il segno occorre rompere la simmetria di inversione. Per far questo basta far ruotare l'anello di velocità angolare ω (a questo punto un inversione di parità provoca anche l'inversione di ω).

A questo punto avremo una corrente superconduttiva che avrà una densità di carica pari a qn_b , e una corrente normale (che mantiene neutro il superconduttore):

$$\begin{array}{ll} \text{Corrente SC} & qn_b \\ \text{Corrente normale} & -qn_b \end{array}$$

In aggiunta abbiamo la legge di Ampere:

$$\nabla \times B = \mu_0(J_s - qn_b v) \quad v = \omega \times r$$

Dove J è la supercorrente rispetto alle coordinate stazionarie rispetto all'anello. Facendo il rotore e considerando che

$$\nabla \times v = 2\omega$$

Questo porta ad un'equazione:

$$-\nabla^2 B = \mu_0 \nabla \times J_s - 2\mu_0 qn_b \omega$$

Il rotore di J_s si ricava dall'equazione di London (1.9):

$$\nabla \times \Lambda J_s = -B \quad \Lambda = \frac{m_b}{n_b q^2}$$

$$-\nabla^2 B = -\frac{\mu_0 n_b q^2}{m_b} B - 2\mu_0 qn_b \omega$$

$$\nabla^2 B = \left(\frac{\mu_0 n_b q^2}{m_b} \right) \left(B + \frac{2m_b \omega}{q} \right)$$

Riconoscendo il coefficiente λ_L :

$$\lambda_L^2 = \frac{m}{\mu_0 n_b q^2}$$

$$\nabla^2 B = \frac{B}{\lambda_L^2} + \frac{2m_b \omega}{\lambda_L^2 q}$$

A questo punto possiamo definire il campo magnetico di London:

$$B_L = -\frac{2m_b \omega}{q} =$$

$$\nabla^2 B = \frac{B - B_L}{\lambda_L^2} \quad (1.11)$$

Se guardiamo la soluzione unidimensionale del problema otteniamo:

$$\frac{d^2 B}{dz^2} = \frac{B(z) - B_L}{\lambda_L^2}$$

Che ha per soluzione:

$$B(z) = B_L + C_1 e^{\frac{z}{\lambda_L}} + C_2 e^{-\frac{z}{\lambda_L}}$$

Imponendo le condizioni di fisicità per $z \rightarrow \pm\infty$ e le condizioni al contorno otteniamo:

$$B(z) = B_L + (B_0 - B_L) \exp\left(-\frac{|z|}{\lambda_L}\right)$$

Dove z è in questo caso il raggio dell'anello (?). Quello che avviene è che il campo magnetico tende a stabilizzarsi all'interno dell'anello attorno ad un valore pari al campo magnetico di London, che dipende dalla velocità di rotazione dell'anello. Questo campo magnetico può essere misurato, da cui si ricava il rapporto tra la massa dei portatori e la carica. Poiché la massa è sempre un numero positivo la determinazione del segno del campo di London

$$q = -2e \quad m_b = 2m_e$$

Da cui si capisce che la conduzione è dovuta alle coppie.

1.7.1 Monopoli di Dirac

Riguardiamo le cose dal punto di vista del campo quantistico. Supponiamo di avere un campo bosonico, di energia ω e densità $n(r)$. L'ampiezza di probabilità

$$E(r) = (4\pi\hbar\omega)^{\frac{1}{2}} \sqrt{n(r)} e^{i\theta(r)}$$

$$E^* E = 4\pi\hbar\omega n(r)$$

Cioè un'ampiezza della energia. Prendiamo

$$\psi \sim \sqrt{n} e^{i\theta(r)}$$

L'operatore velocità

$$v = \frac{1}{m} \left(p - \frac{q}{c} A \right) = \frac{1}{m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{q}{c} A \right)$$

Il flusso è

$$\psi^* v \psi = \frac{n}{m} \left(\hbar\nabla\theta - \frac{q}{c} A \right)$$

$$\nabla \times J = -\frac{nq^2}{m_c} B$$

Il flusso si può calcolare lungo il solito circuito c

$$\oint_c \nabla\theta dl = 2\pi n$$

Supponiamo di avere un monopolio magnetico all'interno di un anello. Il monopolio magnetico genererà un campo magnetico del tipo:

$$B = \frac{g}{r^2}$$

Con g carica magnetica. Il flusso attraverso una semisfera che ha per bordo l'anello superconduttivo è dato da

$$\frac{g}{r^2} (2\pi r^2) = 2\pi g$$

Dove $2\pi r^2$ è la superficie di mezza sfera. Poiché il flusso del superconduttore è quantizzato, g può assumere solo valori multipli di:

$$g = \frac{\hbar c}{e} n$$

Quindi esiste un minimo valore possibile per l'eventuale carica magnetica:

$$g_{min} = \frac{\hbar c}{2e}$$

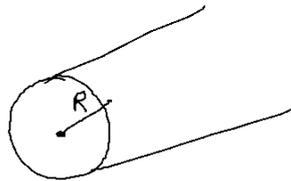
1.7.2 Resistenza alla rottura dello stato SC

Se mette una corrente su superconduttore questa rimane lì per secoli. Il punto chiave di questo discorso è la lunghezza di coerenza. La corrente mantiene un flusso di un certo numero di flussoidi, e il flusso può cambiare solo se c'è una fluttuazione termica che cambia un pezzo di volume del sistema di ordine ξ .

Questa probabilità è pari al fattore di Boltzman:

$$P \approx e^{-\Delta F/k_b T}$$

Immaginiamo di aver un cavo di sezione di raggio R :



Il volume minimo da distruggere è pari a

$$V_{min} = R^2 \xi$$

l'eccesso di energia libera per unità di volume, dall'esperimento del campo critico vale:

$$E_c = \frac{H_c^2}{8\pi}$$

Se

$$R \sim \xi \sim 10^{-4} \text{ m} \quad H_c \sim 10^3 \text{ G}$$

$$\Delta F \sim 10^{-7} \text{ erg}$$

Se ci mettiamo ad una temperatura dell'ordine

$$T \sim 0.8T_c \quad e^{-\Delta F/k_b T} \sim \exp(-10^8)$$

La probabilità di Arrhenius è la densità di probabilità per unità di tempo di osservare un oscillatore armonico in un ensemble isoterma, di frequenza ω_0 , avere l'energia V :

$$P \sim \omega_0 e^{-V/k_b T}$$

Nel nostro caso ω_0 rappresenta il numero di tentativi fatti dal sistema nell'unità di tempo.

Per avere il rate completo dobbiamo considerare la frequenza del sistema:

$$\omega_0 \approx \frac{E_g}{\hbar} = 10^{12} \text{ s}^{-1}$$

Da cui stimiamo un rate pari a

$$P \sim 10^{-43 \cdot 10^7} \text{ Hz} \quad T \sim 10^{43 \cdot 10^7} \text{ s}$$

Il tempo dell'universo è 10^{18} s, Il sistema è rigido su una lunghezza ξ , se vogliamo farlo diventare resistivo dobbiamo farlo su un volume di ordine ξ^3 , un volume di ordine ξ^3 è quasi macroscopico, quindi roperlo per fluttuazioni termiche è quasi impossibile. Però la fluttuazione termica agisce pure sull'elettrone singolo, e questo può superare la gap. Si può disturbare il superconduttore eccitando qualche elettrone, tuttavia non stiamo cambiando lo stato superconduttivo del sistema (e quindi la conducibilità rimane infinita), Per rompere lo stato superconduttivo devo ammazzare tutte le coppie di Cooper nell'arco di una lunghezza di correlazione.

1.8 Effetto Josefson

1.8.1 Tunnelling quantistico delle coppie di Cooper

L'effetto Josephson è un articolo del '62, è un effetto tunnel tra superconduttori. In una giunzione superconduttore-isolante-superconduttore c'è una supercorrente che fluisce liberamente senza bisogno di una differenza di potenziale.

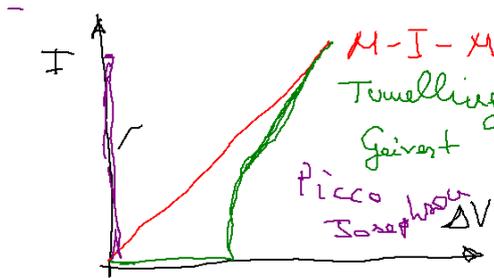


Figura 1.20: Schema della corrente in funzione della differenza di potenziale applicata sul materiale. In rosso la giunzione M-I-M, che è una retta a causa della presenza di tunnelling degli elettroni attraverso l'isolante tra i due metalli. La pendenza di questa retta (Resistenza) è data dalla probabilità di tunnelling. In verde e viola sono invece gli andamenti in una giunzione SC-I-SC.

In una giunzione M-I-M (Metallo-Isolante-Metallo) ci si aspetta una legge simile ad Ohm, a causa del tunnelling degli elettroni. La pendenza della retta

è la probabilità che gli elettroni facciano tunnel attraversando la barriera di potenziale fatta dall'isolante.

In un superconduttore invece si apre una *gap*, quindi c'è bisogno di una certa energia per promuovere gli elettroni dallo stato superconduttivo allo stato metallico, questo è il motivo per cui a piccoli valori di ΔV il sistema non conduce corrente.

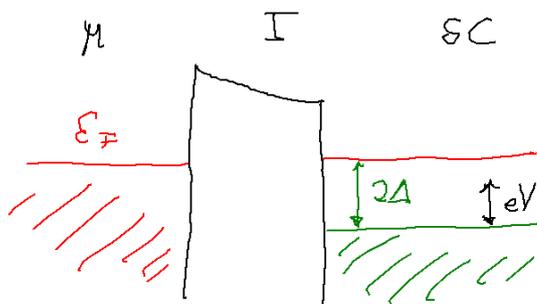


Figura 1.21: Schema di una giunzione M-I-SC. Il superconduttore ha una *gap* rispetto allo stato metallico che non permette la normale conduzione degli elettroni.

Esiste un valore V_c oltre il quale abbiamo una conduzione simile alla conduzione normale.

Il tunnel di Gaivert descrive la rottura delle coppie, quello di Josephson è un tunnelling delle coppie che fluiscono da un superconduttore all'altro. Questa corrente di Josephson non crea differenza di potenziale ai capi del sistema. Questo effetto è sia in DC, una corrente fluisce all'interno del campione senza campo elettromagnetico, che in alternata.

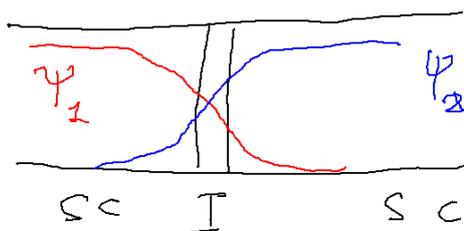


Figura 1.22: Andamento delle funzioni d'onda macroscopiche del sistema a cavallo della giunzione.

Se scriviamo l'equazione per questo campo macroscopico otteniamo

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H$$

Usiamo il formalismo dell'effetto tunnel. Dire che c'è un effetto tunnel equivale a dire che la funzione d'onda di un superconduttore penetra all'interno dell'altro. Questo genera elementi di matrice che mischiano le componenti. Poiché

in questo caso non c'è una differenza di potenziale esterna l'energia sulle due funzioni d'onda possiamo arbitrariamente sceglierla nulla:

$$\langle \psi_1 | H | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | H | \psi_2 \rangle = 0$$

C'è però un termine di scambio:

$$\langle \psi_2 | H | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | H | \psi_2 \rangle = \hbar T$$

Da cui l'equazione di Schroedinger diventa

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = H \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar T \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \hbar T \psi_2 \\ i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \hbar T \psi_1 \end{cases}$$

$$\psi_1 = \sqrt{n_1} e^{i\theta_1} \quad \psi_2 = \sqrt{n_2} e^{i\theta_2}$$

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial t} = \frac{1}{2} n_1^{-\frac{1}{2}} e^{i\theta_1} \frac{\partial n_1}{\partial t} + i\psi_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -iT\psi_2$$

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial t} = \frac{1}{2} n_2^{-\frac{1}{2}} e^{i\theta_2} \frac{\partial n_2}{\partial t} + i\psi_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -iT\psi_1$$

Moltiplichiamo la prima equazione per

$$n_1^{\frac{1}{2}} e^{-i\theta_1} \quad \delta = \theta_2 - \theta_1$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_1}{\partial t} + in_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -iT\sqrt{n_1 n_2} e^{i\delta}$$

Moltiplichiamo la seconda per

$$n_2^{\frac{1}{2}} e^{-i\theta_2}$$

E otteniamo

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_2}{\partial t} + in_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -iT\sqrt{n_1 n_2} e^{-i\delta}$$

Se uguagliamo la parte reale e immaginaria delle due equazioni otteniamo:

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = 2T\sqrt{n_1 n_2} \sin \delta$$

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = -2T\sqrt{n_1 n_2} \sin \delta$$

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -T\sqrt{\frac{n_2}{n_1}} \cos \delta$$

$$\frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -T\sqrt{\frac{n_1}{n_2}} \cos \delta$$

Assumiamo che

$$n_1 \approx n_2$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial\theta_1}{\partial t} &= \frac{\partial\theta_2}{\partial t} \\ \frac{\partial}{\partial t}(\theta_2 - \theta_1) &= 0 \\ \frac{\partial n_2}{\partial t} &= -\frac{\partial n_1}{\partial t}\end{aligned}$$

Quello che avviene è che c'è una corrente di bosoni che fluisce da un mezzo all'altro. Questa corrente è proporzionale a quanto aumenta il numero di coppie in un mezzo (uguale a quanto diminuisce nell'altro):

$$J_{12} \sim \frac{\partial n_2}{\partial t}$$

Da cui si ottiene che

$$J = J_0 \sin \delta = J_0 \sin(\theta_2 - \theta_1)$$

Questa è l'equazione di Josephson, la corrente dipende dallo sfasamento. La corrente è proporzionale alla probabilità di Tunnelling T che è dentro J_0 . Questa corrente senza campo dipende dalla differenza di fase, la fase è una proprietà macroscopica. Questo θ valgono per l'intero campione, ossia l'intero campione ha una fase ben definita (cosa che non avviene nei conduttori in cui la fase macroscopica è la media di tante fasi microscopiche che si annullano). Possiamo avere conduzione di corrente soltanto dovuta alla natura della fase.

Quindi possiamo avere qualunque corrente tra $\pm J_0$.

1.8.2 Effetto Josephson alternato

Questo effetto Josephson avviene in corrente continua, invece in corrente alternata di curioso avviene è che un campo costante la corrente diventa alternata (Questo è detto effetto AC Josephson).

Mettiamo un campo costante attraverso un potenziale V nella barriera:

$$Vq = -2eV$$

Riscriviamo l'equazione di Schroedinger:

$$i\hbar \frac{\partial\psi_1}{\partial t} = \hbar T\psi_2 - eV\psi_1 \quad (1.12)$$

$$i\hbar \frac{\partial\psi_2}{\partial t} = \hbar T\psi_1 + eV\psi_2 \quad (1.13)$$

Abbiamo sostituendo la funzione d'onda bosonica.

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_1}{\partial t} + in_1 \frac{\partial\theta_1}{\partial t} = -iT\sqrt{n_1 n_2} e^{i\delta} + ieVn_1 \hbar^{-1} \quad (1.14)$$

Prendendo la parte reale si ottiene

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = 2T\sqrt{n_1 n_2} \sin \delta \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial\theta_1}{\partial t} = \left(\frac{eV}{\hbar} \right) - T\sqrt{\frac{n_2}{n_1}} \cos \delta \quad (1.16)$$

Analogamente

$$\frac{1}{2} \frac{\partial n_2}{\partial t} + in_1 \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -iT\sqrt{n_1 n_2} e^{-i\delta} - ieV n_1 \hbar^{-1} \quad (1.17)$$

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = -2T\sqrt{n_1 n_2} \sin \delta \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial \theta_2}{\partial t} = -\left(\frac{eV}{\hbar}\right) - T\sqrt{\frac{n_2}{n_1}} \cos \delta \quad (1.19)$$

Supponendo

$$n_1 \approx n_2$$

Si ottiene

$$\frac{\partial(\theta_2 - \theta_1)}{\partial t} = -\frac{2eV}{\hbar} \quad (1.20)$$

Quindi la differenza di fase tra i due superconduttori varia come

$$\delta(t) - \delta(0) = -\left(\frac{2eV}{\hbar}\right) t$$

$$J(t) = J_0 \sin \left[\delta(0) - 2\frac{eVt}{\hbar} \right] \quad \omega = \frac{2eV}{\hbar} \quad (1.21)$$

Misurando il voltaggio e la frequenza otteniamo:

$$\frac{e}{\hbar}$$

Possiamo misurare le costanti fondamentali della natura grazie alla rigidità delle funzioni d'onda macroscopiche del superconduttori.

1.8.3 Macroscopic Quantum Interference

L'interferenza quantistica macroscopica può essere usato per misure molto accurate, come per gli SQUID.

Questo si fa usando due giunzioni Josepson

$$\theta_2 - \theta_1 = \left(\frac{2e}{\hbar c}\right) \Phi$$

Consideriamo il parallelo di due giunzioni Josepson:

La corrente può fluire o nel cammino J_a o J_b . In assenza di campo magnetico le due fasi dei superconduttori sono uguali. Poiché il flusso del campo magnetico è quantizzato, non tutte le correnti sono consentite all'interno dell'oggetto:

$$B \rightarrow \Phi$$

Da cui la differenza di fase deve rispettare la quantizzazione del flusso.

$$\delta_b - \delta_a = \left(\frac{2e}{\hbar c}\right) \Phi$$

$$\delta_b = \delta_0 + \frac{e}{\hbar c} \Phi \quad \delta_a = \delta_0 - \frac{e}{\hbar c} \Phi$$

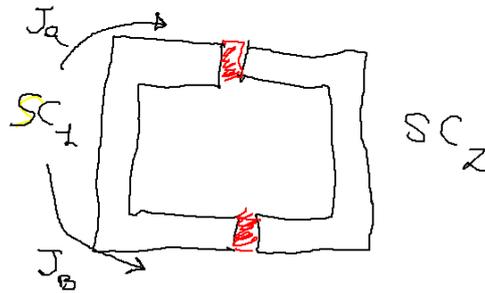


Figura 1.23: Due giunzioni Josefson in parallelo.

A questo punto possiamo calcolare le correnti che scorrono nelle due giunzioni.

$$J_{tot} = J_0 \left[\sin \left(\delta_0 + \frac{e}{\hbar c} \Phi \right) + \sin \left(\delta_0 - \frac{e}{\hbar c} \Phi \right) \right]$$

$$J_{tot} = 2J_0 \sin \delta_0 \cos \frac{e\Phi}{\hbar c}$$

Da cui abbiamo un a corrente che varia con Φ flusso ed ha un valore quantizzato:

$$J_{max} = \frac{e\Phi}{\hbar c} = s\pi$$

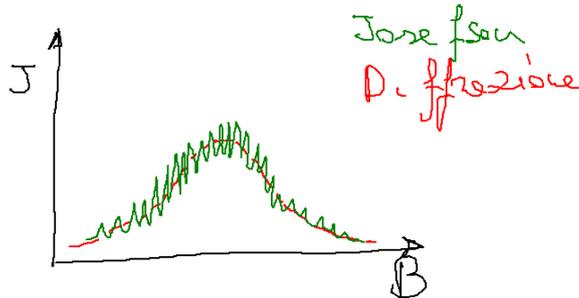


Figura 1.24: Misura della corrente massima J , meccanismo dell'interferenza quantistica.

Questa è l'interferenza.

Un superconduttore ad alta temperatura è come una infinità di giunzioni Josefson accoppiati.

Capitolo 2

Teoria dei fononi

La trattazione che abbiamo visto dei superconduttori nel capitolo introduttivo è di tipo fenomenologico. Con argomentazioni motivate dai risultati sperimentali abbiamo costruito un modello a *gap* dello stato superconduttivo, descritto da una funzione d'onda di natura bosonica (condensata nello stato fondamentale).

In questo capitolo andremo più affondo, cercando di costruire una teoria microscopica completa della superconduttività.

Grazie alla quantizzazione del flusso e all'effetto Josephson è possibile dimostrare che in un superconduttore i portatori di carica sono le coppie di elettroni. Tuttavia costruire una teoria che permetta di far formare a due elettroni uno stato di coppia legato è molto difficile visto le energie in gioco. Gli elettroni hanno energie di repulsione tipiche dell'ordine dell'elettron-volt. Gli stati superconduttori si formano a temperature di pochi gradi Kelvin:

$$1eV = 11000 \text{ K} \quad T_c \approx 1 - 20 \text{ K}$$

Quindi il processo base della superconduttività è strano. Ci furono numerosi tentativi errati di descrivere la superconduttività microscopicamente, da eccelsi fisici quali Einstein, Landau, Feynman, Bohr, Heisenberg, Thomson.

La teoria BCS emerge da un intuizione fenomenologica, non dalla deduzione della fisica matematica. L'intuizione che l'interazione tra elettroni nella coppia fosse mediata da fononi è dovuta all'effetto isotopico (variazione della temperatura critica in funzione della massa del nucleo, a parità di proprietà elettroniche).

Il problema è che studiando l'interazione elettrone-fonone con approcci perturbativi non si arriva all'effetto Meisner.

Il quadro della superconduttività pre BCS è il seguente:

- Deve essere un fenomeno quantistico.
 - Metalli normali
 - Sommerfield
 - Liquidi di fermi
 - Teoria di Landau
- Interazione coulombiana (Heisenberg)

- Effetto isotopico $T_c \sim M^{-\frac{1}{2}}$. Questo indica una interazione elettroni-fononi.
 - Energy Gap model
 - Coppia di Cooper
 - BCS

L'intera strategia usata fino alla coppia di Cooper è data dal disperato tentativo di mantenere la singola particella. Si voleva sfruttare qualcosa tipo il teorema di Bloch, se gli atomi sono periodici questi non fanno scattering. La teoria di Landau dei liquidi di Fermi dice che le quasi particelle hanno un tempo di vita, che è la parte immaginaria della self-energia. Tuttavia questi modelli falliscono nello spiegare la superconduttività. L'effetto isotopico inserisce l'interazione tra fononi ed elettroni, viene sviluppata e porta alle coppie di Cooper.

L'interazione Coulombiana era stata ipotizzata da Heisenberg, tuttavia non si è andati molto lontani. Sorge un problema: come può l'interazione fonone-elettrone superare la repulsione coulombiana? E una volta che due elettroni si attraggono, come generano la superconduttività.

Esistono anche superconduttori pseudo-BCS, in cui l'interazione mediante non è data dal fonone ma è interazione di spin (magnone). I cuprati superconduttori ancora oggi non hanno chiarificato quale sia l'origine del fenomeno superconduttivo. La Gap può essere creata in modo BCS: un elettrone polarizza il reticolo e l'altro risente di questa polarizzazione.

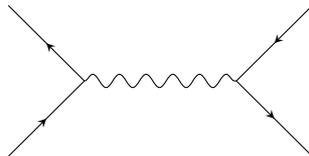


Figura 2.1: Diagramma della coppia di Cooper, teoria BCS.

La gap è data da un diagramma (Figura 2.1), gli elettroni interagiscono in spazio k con i fononi. Possiamo cambiare un po di cose, possiamo usare un magnone al posto del fonone per interazioni di spin. L'altra caratterizzazione è la condensazione di Bose e Einstein. Questa condensazione avviene anche in assenza di interazione. Se riusciamo accoppiare gli elettroni come potremo fare?

Se gli elettroni si legassero in spazio reale, e condensassero in una Bose-Einstein, tutti gli elettroni starebbero nello stato fondamentale, fermi. Una "superconduttività" di questo tipo formerebbe un isolante perfetto.

Anche la condensazione di Bose-Einstein in spazio reale da luogo ad una *gap* di energia nello spettro degli elettroni. Queste sono le uniche due nature della Gap conosciute fino ad adesso. Il nuovo superconduttore H_3S ha una *gap* di tipo BCS.

Uno dei grandi problemi irrisolti nell'interazione coulombiana è che non ha saputo esprimere una terza Gap equation e non ha saputo dare un'interpretazione chiara di chi siano i nuovi protagonisti.

2.1 Seconda quantizzazione dei fononi

Il teorema di Mermin afferma che:

Data un parametro d'ordine continuo esiste una dimensione critica ($D = 2$) del sistema al di sotto del quale il sistema è sempre disordinato.

Ora il parametro continuo può essere il displacement rispetto alla posizione di equilibrio di uno ione atomico. Quindi sembra che non possa esistere l'ordine nei sistemi bidimensionali (come il grafene).

Esiste una transizione di fase di Kosteris e Taunes, che funziona solo in due dimensioni. Questo sembra effettivamente violare il teorema di Mermin. Loro hanno preso la funzione di correlazione tra due parametri diversi come parametro d'ordine, e questo può creare dei vortici che portano ad ordinare il sistema facendogli fare una transizione di fase.

2.1.1 Dispersione classica

Immaginiamo di avere un trenino su un binario, ad una certa temperatura, le fluttuazioni sulla posizione del singolo vagone divergono. Tuttavia, se invece di considerare un solo vagone calcoliamo le fluttuazioni sulla distanza media tra due vagoni consecutivi (funzione di correlazione), la divergenza sparisce:

$$\langle |\delta x|^2 \rangle \rightarrow \infty$$

$$\langle |\delta x_i - \delta x_{i+1}|^2 \rangle \neq \infty$$

Vediamo questo calcolo nel caso unidimensionale.

Prendiamo una posizione dei equilibrio del reticolo R_{n0} e lo spostamento δR_n dalla posizione di equilibrio. La Hamiltoniana del sistema è

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(R_i - R_j) \quad (2.1)$$

Prendiamo lo sviluppo attorno alla posizione di equilibrio al secondo ordine¹

$$H \approx \sum_i \frac{p_i^2}{2M} + \sum_{i \neq j} V(R_{i0} - R_{j0}) + \sum_{ij} \frac{A_{ij}}{2} \delta R_i \delta R_j \quad (2.2)$$

$$A_{ij} = \frac{\partial^2 V(R_i - R_j)}{\partial R_i \partial R_j} \quad (2.3)$$

A questo punto ci scriviamo le equazioni del moto

$$\dot{P}_i = M \delta \ddot{R}_i = - \frac{\partial H}{\partial R_i} = - \sum_{kh} A_{kh} \left(\frac{\delta R_k \delta_{ih} + \delta R_h \delta_{ki}}{2} \right) \quad (2.4)$$

Rinominando l'indice muto della somma in $k \rightarrow h$ e sfruttando che $A_{kh} = A_{hk}$, come si evince dall'equazione (2.3).

$$\dot{P}_i = - \sum_h A_{ih} \delta R_h \quad (2.5)$$

¹L'ordine più basso non banale diverso da zero.

L'equazione da risolvere è pertanto:

$$M\delta\ddot{R}_i = - \sum_h A_{ih}\delta R_h \quad (2.6)$$

Cerchiamo delle soluzioni in termini di onde rispetto al tempo (trasformata di Fourier):

$$\delta R_i(t) = e^{-i\omega t}\delta R_i \quad (2.7)$$

$$M\omega^2\delta R_i = \sum_h A_{ih}\delta R_h \quad (2.8)$$

Abbiamo diagonalizzato rispetto al tempo, dobbiamo diagonalizzarla anche rispetto allo spazio. Possiamo scrivere il sistema come somma di variabili collettive, ciascuna dei quali sono i fononi. Vogliamo onde nello spazio:

$$\delta R_n = \sum_k q_k e^{ikR_{n0}} \quad (2.9)$$

Quando sostituiamo viene la relazione di dispersione:

$$M\omega^2 \sum_k q_k e^{ikR_{i0}} = \sum_h A_{ih} \sum_k q_k e^{ikR_{h0}} \quad (2.10)$$

Sfruttando la proprietà di biunivocità delle trasformate di Fourier possiamo eliminare la somma sui k :

$$M\omega^2 q_k = \sum_h A_{ih} q_k e^{ik(R_{h0}-R_{i0})} \quad (2.11)$$

Questa somma va fatta solo sui primi vicini. Questo dipende dalla forma del potenziale $V(\{\vec{R}\})$, da cui si calcola la matrice A_{ij} .

Questa è la relazione di dispersione della catena unidimensionale. Possiamo introdurre le coordinate normali p_k e q_k dell'onda che ha frequenza ω_k .

$$p_i = \sqrt{\frac{M}{N}} \sum_k p_k e^{ikR_{i0}} \quad \delta R_i = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_k q_k e^{ikR_{i0}} \quad q_k = \sqrt{\frac{M}{N}} \sum_i \delta R_i e^{-ikR_{i0}} \quad (2.12)$$

Dal fatto che p_i e δR_i devono essere reali si ha la condizione:

$$p_k^* = p_{-k} \quad q_k^+ = q_{-k}$$

Grazie alle nuove variabili adesso è possibile passare alla descrizione dei fononi in seconda quantizzazione, semplicemente sostituendo alle variabili i rispettivi operatori quantistici, con le giuste regole di commutazione.

2.1.2 Quantizzazione dei modi normali

Riscriviamo l'hamiltoniana nella nuova base:

$$H = \sum_k \frac{p_k^* p_k}{2} + \omega_k^2 \frac{q_k^* q_k}{2} \quad (2.13)$$

La quantizzazione avviene interpretando p_k e q_k come operatori, e imponendo le regole di commutazione. Rispetto al sito le regole di commutazione sono:

$$[p_i, \delta R_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij} \quad [P_i, P_j] = 0 \quad [R_i, R_j] = 0 \quad (2.14)$$

Con le trasformazioni si ottiene:

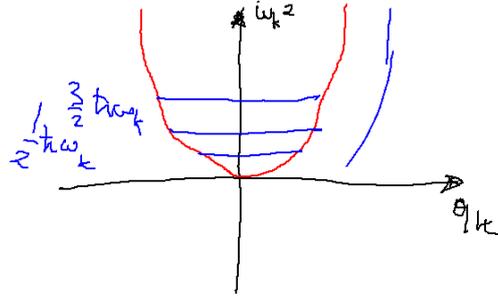
$$[p_k, q_{k'}] = \frac{\hbar}{i} \delta_{kk'} \quad [p_k, q_{k'}] = 0 \quad (2.15)$$

Ora introduciamo gli operatori di creazione e distruzione.

$$p_k = i\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}}(a_k^\dagger - a_{-k}) \quad q_k = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}}(a_k + a_{-k}^\dagger) \quad (2.16)$$

Il motivo per cui appaiono gli operatori a_{-k} è che l'operatore p_k deve soddisfare la regola (2.1.1).

Questi operatori a_k^\dagger e a_k , rispettivamente, creano e distruggono un fonone di momento k .



Invertendo queste equazioni si ricavano gli operatori di creazione e distruzione:

$$a_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\omega_k\hbar}}(\omega q_{-k} - ip_k)$$

La Hamiltoniana può essere riscritta come

$$H = \sum_k \hbar\omega_k \left[a_k^\dagger a_k + \frac{1}{2} \right]$$

Dove l'operatore $N_k = a_k^\dagger a_k$ conta il numero di occupazione dei fononi di momento k .

$$N_k = a_k^\dagger a_k \quad N_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle$$

Se definiamo

$$P_k = \sqrt{M} p_k$$

$$\langle n_k | P_k | n_k + 1 \rangle = -\langle n_k + 1 | P_k | n_k \rangle = -i\sqrt{\frac{n_k + 1}{2}}$$

Da questo ne segue che

$$\langle n_k | a_k | n_{k+1} \rangle = n_{k+1} \langle a_k^\dagger | n_k \rangle = \sqrt{n_k + 1}$$

$$a_k |n_k\rangle = \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle \quad a_k^\dagger |n_k\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle \quad a_k |0\rangle = 0$$

Da cui si ricava

$$a_k^\dagger a_k |n\rangle_k = n_k |n\rangle_k$$

2.1.3 Fluttuazione quadratica media

Vogliamo calcolare i valori

$$\langle |\delta R_j|^2 \rangle \quad \langle |\delta R_j - \delta R_{j+1}|^2 \rangle$$

Dobbiamo scrivere gli operatori corrispondenti alle quantità fisiche di cui vogliamo misurare le proprietà, sfruttando le equazione (2.16):

$$\delta R_j = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} (a_k + a_{-k}^+) e^{ikR_{j0}} \quad (2.17)$$

$$\delta R_{j+1} = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} (a_k + a_{-k}^+) e^{i(kR_{j0} + k_x d)} \quad (2.18)$$

Dove k_x è la direzione degli atomi.

$$\delta R_j - \delta R_{j+1} = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_k}} (a_k + a_{-k}^+) (1 - e^{-ik_x d}) e^{ikR_{j0}}$$

$$\langle |\delta R_j - \delta R_{j+1}|^2 \rangle = \left\langle \frac{\hbar}{2MN} \sum_{kk'} \frac{(a_k + a_{-k}^+) (a_{k'}^+ + a_{-k'})}{\sqrt{\omega_k} \sqrt{\omega_{k'}}} (1 - e^{-ik_x d}) (1 - e^{-ik'_x d}) e^{iR_{j0}(k-k')} \right\rangle$$

La media termica consiste nel mediare questa quantità anche sull'indice j . Questo fa sì che l'ultimo esponenziale tiri fuori una $\delta_{kk'}$, grazie al quale possiamo contrarre il risultato

$$\frac{\hbar}{2MN} \sum_k \frac{\langle a_k^+ a_k \rangle + \langle a_{-k} a_{-k}^+ \rangle}{\omega_k} (1 - \cos k_x d)$$

Dove la media termica di un osservabile è definita dalla statistica di Boltzmann:

$$\langle O \rangle = \sum_{n_k} \langle n_k | O | n_k \rangle e^{-\beta E_{n_k}} \quad (2.19)$$

Da questo si ottiene

$$\frac{\hbar}{NM} \sum_k \frac{n_k + \frac{1}{2}}{\omega_k} (1 - \cos k_x d)$$

n_k deve essere pesato termicamente, questo peso termicamente è dato dalla statistica di Bose-Einstein.

$$\langle |\delta R_j - \delta R_{j+1}|^2 \rangle = \frac{\hbar}{NM} \sum_k \frac{n(k) + \frac{1}{2}}{\omega_k} (1 - \cos k_x d)$$

Abbiamo trovato un espressione chiusa precisa per la fluttuazione quadratica media. Dobbiamo verificare in che condizioni questa sommatoria possa divergere.

La distribuzione $n(k)$ è la Bose-Einstein:

$$n(k) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_b T} - 1} \quad n(k) \xrightarrow{\omega \rightarrow 0} \frac{k_b T}{\hbar\omega_k} \gg 1 \quad (2.20)$$

A noi interessa la zona della dispersione ω_k attorno a zero. Attorno a quella descrizione ci sono sempre fononi per cui $\hbar\omega \rightarrow 0$.

$$\langle |\delta R_j - \delta R_{j+1}|^2 \rangle = \frac{k_b R}{MN} \sum_{\vec{k}} \frac{1 - \cos k_x d}{\omega_k^2} \quad (2.21)$$

Trasformiamo la somma in un integrale:

$$\sum_{\vec{k}} \frac{1 - \cos k_x d}{\omega_k^2} \approx \sum_{\vec{k}} \frac{k_x^2 d^2}{2\omega_k^2}$$

Usiamo le coordinate sferiche per l'integrazione:

$$\sum_{\vec{k}} \frac{k_x^2}{\omega_k^2} = \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^{k_{max}} dk \frac{k^{(D-1+2)}}{\omega_k^2} \quad (2.22)$$

Vediamo il contributo dei modi acustici ($\omega_k = vk$):

$$\int_0^{k_{max}} dk \frac{k^{D-1}}{v^2} \neq \infty$$

Questo fa sì che l'ultimo integrale converga ad ogni dimensione. Se invece avessimo calcolato il termine diagonale ($\langle |\delta R_i|^2 \rangle$) non avremmo avuto il $\cos(k_x d)$, quindi il k_x^2 al numeratore non ci sarebbe stato. In questo caso avremmo avuto:

$$\int_0^{k_{max}} \frac{k^{D-1}}{k^2} dk \quad (2.23)$$

Questo integrale diverge per $D \leq 2$. Questo è il teorema di Mermin-Vagner. Questa divergenza è salvata dal k_x^2 che viene dallo sviluppo del coseno nei termini non diagonali.

2.1.4 Divergenza Mermin

Vediamo la forma della divergenza di Mermin in una dimensione:

$$\sum_k \sim \int_0^{k_{max}} \frac{dk}{k^2} \quad (2.24)$$

In realtà il sistema è quantizzato, quindi il primo vero stato del sistema è $\frac{2\pi}{Na}$:

$$\sum_k \sim \int_{\frac{1}{N}}^{k_{max}} \frac{dk}{k^2} \sim N \quad (2.25)$$

Quindi in una dimensione la divergenza come la grandezza del sistema.

In due dimensioni le cose diventano molto meno gravi:

$$\int_{\frac{1}{N}}^{k_{max}} \frac{dk}{k} \sim \ln N \quad (2.26)$$

Questa divergenza va come il $\ln N$, è quindi poco grave. Con piccoli aggiustamenti strutturali, come delle corrugazioni di superficie, il sistema riesce

a eliminare questa divergenza, stabilizzandosi. Spesso si usa, per comodità, la convenzione:

$$\ln \infty = 4\pi \quad (2.27)$$

Perché nei solidi ∞ è circa 10^{10} , il cui logaritmo è simile a 4π .

Nel grafene nello spazio è in genere corrugato. Il grafene sfrutta la terza dimensione per uccidere questa singolarità, crea un accoppiamento tra i modi longitudinali e quello trasversare.

Il DNA è molto più grave come problema, in realtà no perché vive circondato da un liquido che rende il sistema tridimensionale. E un elastico appeso per gli estremi? Per quanto un millimitro sia piccolo, non è proprio unidimensionale.

2.2 Seconda quantizzazione per gli elettroni

Gli elettroni sono molto diversi dai fononi perché sono dei fermioni. L'hamiltoniana di base degli elettroni è

$$H_0 = H_{el} = \sum_k \varepsilon_k b_k^\dagger b_k \quad (2.28)$$

Dove ε_k sono le curve di dispersione, b_k e b_k^\dagger sono gli operatori fermionici. Le regole di anticommutazione sono:

$$\{b_k, b_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'} \quad \{b_k, b_{k'}\} = \{b_k^\dagger, b_{k'}^\dagger\} = 0 \quad (2.29)$$

Calcoliamo come il sistema di elettroni risponde ad un potenziale $\phi(x)$. Prendiamo una Hamiltoniana con N atomi:

$$H_I = \sum_j \phi(x_j) = \int \phi(x) \left[\sum_j \delta(x - x_j) \right] dx \quad (2.30)$$

Da cui la densità elettronica è

$$\rho(x) = \sum_j \delta(x - x_j) \quad (2.31)$$

Definiamo gli operatori di campo che creano e distruggono un elettrone nella posizione x . Gli operatori di campo sono

$$\psi^\dagger(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k b_k^\dagger e^{-ikx} \quad (2.32)$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k b_k e^{ikx} \quad (2.33)$$

La densità di elettroni possiamo scriverla in seconda quantizzazione:

$$\rho(x) = \psi^\dagger(x)\psi(x) = \frac{1}{L} \sum_{k k'} b_{k'}^\dagger b_k e^{i(k'-k)x} = \sum_k b_{k-q}^\dagger b_k = \frac{1}{L} \sum_q \rho_q e^{-iqx} \quad (2.34)$$

$$\rho_q = \sum_k b_{k-q}^\dagger b_k \quad (2.35)$$

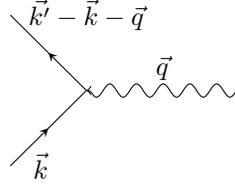


Figura 2.2: Diagramma del vertice di densità elettronica.

$$q = k - k' \quad (2.36)$$

Dove possiamo dare una rappresentazione diagrammatica Figura 2.2

Possiamo scrivere il potenziale $\phi(x)$ come:

$$\phi(x) = \frac{1}{L} \sum_k \phi_k e^{ikx}$$

Con questo tipo di formalismo il potenziale di interazione è:

$$H_I = \int dx \phi(x) \rho(x) = \int dx \frac{1}{L} \sum_{k'} e^{ik'x} \phi_{k'} \frac{1}{L} \sum_q e^{iqx} \rho_q \quad (2.37)$$

$$H_I = \frac{1}{L^2} \int dx \sum_{k', q} e^{i(k'+q)x} \phi_{k'} \rho_q \quad (2.38)$$

Possiamo sfruttare che

$$\frac{1}{L} \int dx e^{i(k'+q)x} = \delta(k' + q) \quad (2.39)$$

$$H_I = \frac{1}{L} \sum_{k, q} \phi_k \rho_q \delta(k' + q) = \sum_q \phi_{-q} \rho_q \quad (2.40)$$

Se abbiamo un potenziale a onda reale:

$$\phi(x) = \cos(x) \quad H_I = \phi_q \rho_{-q} + \phi_{-q} \rho_q \quad (2.41)$$

Che effetto fa questo agli elettroni? Consideriamo le coppie elettrone-buca e la densità di queste coppie. Una coppia di momento $-\hbar q$ è definita dall'operatore

$$\rho_{kq} = b_{k-q}^\dagger b_k \quad (2.42)$$

Usiamo l'equazione di Heisenberg per gli operatori:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{kq} = [\rho_{kq}, H] = [\rho_{kq}, H_0] + [\rho_{kq}, H_I] \quad (2.43)$$

Facciamo il primo pezzo:

$$\begin{aligned} [\rho_{kq}, H_0] &= b_{k-q}^\dagger b_k \sum_{k'} \varepsilon_{k'} b_{k'}^\dagger b_{k'} - \sum_{k'} \varepsilon_{k'} b_{k'}^\dagger b_{k'} b_{k-q}^\dagger b_k \\ &= \sum_{k'} \varepsilon_{k'} \left[b_{k-q}^\dagger b_k b_{k'}^\dagger b_{k'} - b_{k'}^\dagger b_{k'} b_{k-q}^\dagger b_k \right] \end{aligned}$$

$$b_k b_{k'}^\dagger = \delta_{kk'} - b_{k'}^\dagger b_k \quad (2.44)$$

$$b_{k'} b_{k-q}^\dagger = \delta_{k',k-q} - b_{k-q}^\dagger b_{k'} \quad (2.45)$$

$$[\rho_{kq}, H_0] = \sum_{k'} \varepsilon_{k'} \left[\delta_{kk'} b_{k-q}^\dagger b_{k'} - b_{k-q}^\dagger b_{k'}^\dagger b_k b_{k'} - \delta_{k',k-q} b_{k'}^\dagger b_k - b_{k-q}^\dagger b_{k'}^\dagger b_{k'} b_k \right] \quad (2.46)$$

I termini con quattro operatori si annullano (bisogna scambiare i due operatori di distruzione ancora una volta).

$$[\rho_{kq}, H_0] = (\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q}) \rho_{kq} \quad (2.47)$$

Dobbiamo fare la stessa cosa con la hamiltoniana di interazione:

$$\begin{aligned} [\rho_{kq}, H_I] &= \phi_q b_{k-q}^\dagger b_k \sum_k b_{k'+q}^\dagger b_{k'} - \sum_{k'} b_{k'+q}^\dagger b_{k'} \left(b_{k-q}^\dagger b_k \right) + \\ &+ \phi_{-q} b_{k-q}^\dagger b_k \sum_k b_{k'+q}^\dagger b_{k'} - \sum_{k'} b_{k'+q}^\dagger b_{k'} \left(b_{k-q}^\dagger b_k \right) = \\ &= \phi_q \left(b_{k-q}^\dagger b_{k-q} - b_k^\dagger b_k \right) + \phi_{-q} \left(b_{k-q}^\dagger b_{k+q} - b_{k-2q}^\dagger b_k \right) \end{aligned}$$

Questa è la derivata prima dell'operatore. Per trovare una stabilità bisogna imporre che la media termica della derivata prima sia nulla.

$$\langle \dot{\rho}_{kq} \rangle = 0 \quad (2.48)$$

$$(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q}) \langle \rho_{kq} \rangle + \left[\langle b_{k-q}^\dagger b_{k-q} \rangle - \langle b_k^\dagger b_k \rangle \right] \phi_q = 0 \quad (2.49)$$

La nuova densità è data:

$$\rho_q = \sum_k \rho_{kq} \quad (2.50)$$

La funzione di risposta del sistema, detta suscettività, si calcola dividendo la distorsione introdotta ($\langle \rho \rangle_q$) alla perturbazione introdotta ϕ_q :

$$\tilde{\chi}(q) = \frac{\langle \rho_q \rangle}{\phi_q} = \sum_k \left[\frac{f_{k-q} - f_k}{\varepsilon_{k-q} - \varepsilon_k} \right] \quad (2.51)$$

Dove le f sono le distribuzioni di Fermi-Dirac.

$$f_k = \langle b_k^\dagger b_k \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_k - E_f}{k_b T}\right) + 1} \quad (2.52)$$

Questa è la funzione di Lindard. Il risultato è mostrato in Figura 2.3

La funzione di Lindard è la generalizzazione dello scudo di Thomas-Fermi. Lo scudo di Thomas-Fermi vale solo nel caso di piccole perturbazioni, dove la risposta del materiale si assume indipendente da q .

In una dimensione la funzione di Lindard è singolare, questo perché se mettiamo un potenziale periodico che agisce sugli elettroni si apre una *gap*, che rende il sistema isolante. Se la risposta è infinita il sistema è instabile, e quindi la *gap* si crea spontaneamente. In questo modo il sistema diminuisce l'energia degli elettroni (Figura 2.4)

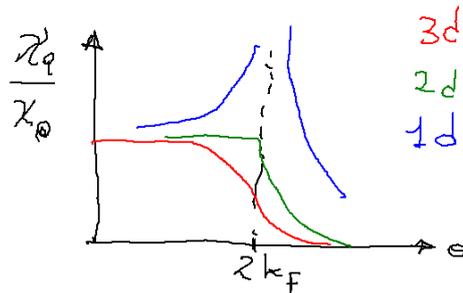


Figura 2.3: Funzione di Lindard in vari campioni di dimensionalità diverse.

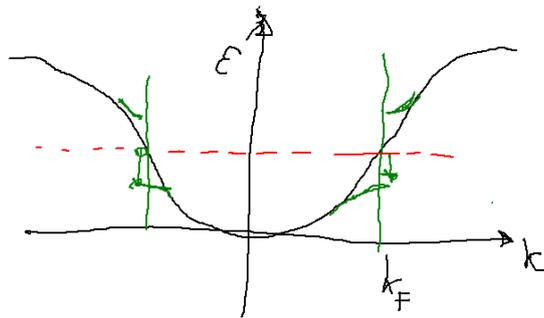


Figura 2.4: Formazione della *gap* unidimensionale.

In una dimensione il sistema è instabile e crea un'onda di densità di carica:

$$n(r) = n_0 + \Delta n \cos(2k_f + \phi)$$

La *gap* che si forma è di singolo elettrone, quindi non può essere collegata alla superconduttività².

2.2.1 Scudo di Thomas-Fermi

Come detto nella scorsa sezione, lo scudo di Thomas-Fermi è il limite a piccoli q della funzione di Lindard.

Vediamo di farne ora una trattazione semplificata.

Immaginiamo di introdurre in un conduttore un potenziale elettrico esterno dato da ϕ_{ext} . Questo indurrà nel materiale una ridistribuzione della carica ρ_{ext} che può essere ottenuta dall'equazione dell'elettrostatica:

$$\nabla^2 \phi_{ext}(r) = -4\pi \rho_{ext}(r)$$

Passiamo nella trasformata di Fourier per diagonalizzare il laplaciano:

$$\rho_{ext}(r) = \rho_{ext}(q) \cos(q \cdot r)$$

²All'inizio della teoria della superconduttività si credeva che questa potesse essere la causa della superconduttività.

Sostituendo si ottiene:

$$\phi_{ext}(q) = \frac{4\pi}{q^2} \rho_{ext}(q) \quad (2.53)$$

In q la risposta è locale. La stessa cosa si può fare per le cariche indotte e il potenziale indotto. Il potenziale totale del materiale è pari al potenziale esterno sommato al potenziale generato dalla nuova distribuzione di carica.

$$\phi(q) = \phi_{ext}(q) + \phi_{ind}(q)$$

Vogliamo studiare la risposta del sistema in funzione del potenziale esterno, definiamo una funzione $\varepsilon(q)$:

$$\varepsilon(q) = \frac{\phi_{ext}(q)}{\phi(q)} = \frac{\rho_{ext}(q)}{\rho(q)}$$

Il potenziale indotto rispetta anche lui l'equazione di Laplace (2.53).

$$\phi_{ind}(q) = -\frac{4\pi e}{q^2} n_{ind}(q)$$

Abbiamo elettroni liberi con il principio di Pauli, e dispersione parabolica:

$$E(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

La densità di elettroni nel metallo è data da

$$n(r) = n_0 + n_{ind}(r) = n_0 + n_{ind}(q) \cos(qr)$$

$$n_{ind} \ll n_0$$

$$\varepsilon(q) = \frac{\phi_{ext}(q)}{\phi(q)} = 1 - \frac{\phi_{ind}(q)}{\phi(q)} = 1 + \frac{4\pi e}{q^2} \frac{n_{ind}(q)}{\phi(q)}$$

Chi è ϕ ? È il potenziale totale, dato questo potenziale totale vogliamo trovare n_{ind} che è la carica indotta. La funzione di Lindard è proprio questo rapporto:

$$\chi(q) = \frac{n_{ind}(q)}{\phi(q)}$$

Questo rapporto, per essere calcolato rigorosamente, richiede la trattazione fatta nella scorsa sezione. Tuttavia, per il limite a piccoli q , interessante per Thomas-Fermi, si può usare un'approssimazione molto rapida.

Scriviamo l'equazione di Schrödinger:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - e\phi(r) \right] \psi(r) = E_k \psi_k(r)$$

$$n_{ind} = |\psi|^2$$

Prendiamo l'approssimazione di piccoli q :

$$q \ll k_f \quad qa \ll 1$$

In questo limite ϕ lo consideriamo costante. Le funzioni d'onda non cambiano e si sposta solo l'energia::

$$\phi(r) \approx \phi_0$$

$$E'(r) = E(r) + \phi_0 \approx E(r) + \phi(r)$$

Ossia l'energia si modifica semplicemente aggiungendo l'energia del potenziale.

$$E(k) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - e\phi(r)$$

Da cui si ricava la nuova energia degli elettroni di superficie (gli unici che possono effettivamente modularsi):

$$E(r) = \varepsilon_f - e\phi(r)$$

Ricaviamo quindi la densità di elettroni indotta dalla modulazione grazie alla nuova energia:

$$n_{ind} = n - n_0$$

n è funzione della nuova energia del sistema, mentre n_0 della vecchia. Supponendo che il sistema stia all'equilibrio (gli elettroni non fluiscono da una parte all'altra del materiale) il potenziale chimico totale deve essere lo stesso in ogni punto. Questo richiede che il nuovo potenziale chimico "interno" si moduli esattamente all'opposto dell'energia elettrostatica:

$$\mu = \mu_0 + e\phi(r)$$

Da cui otteniamo:

$$\begin{aligned} n_{ind}(r) &= n(\mu) - n(\mu_0) \\ n_{ind}(r) &= n(\mu_0 + e\phi(r)) - n(\mu_0) \end{aligned}$$

Linearizzando questa espressione si ottiene:

$$n_{ind}(r) = e\phi(r) \left. \frac{\partial n}{\partial \mu} \right|_{\mu_0 = \varepsilon_f}$$

La derivata della densità di elettroni al variare del potenziale chimico è la densità degli stati del sistema:

$$n_{ind}(r) = e\phi(r)D(E_f)$$

Da cui ricaviamo:

$$\chi(q) = \frac{n_{ind}(q)}{\phi(q)} = eD(E_f)$$

Questo scudo ha un valore costante, che non dipende da q . Ovviamente questo è un risultato dell'approssimazione a piccoli q .

$$\varepsilon(q) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} D(E_f) = 1 + \frac{k_s^2}{q^2}$$

Inseriamo ora un potenziale esterno dovuto ad una carica puntiforme.

$$\phi_{ext}(r) = \frac{1}{r} \quad \phi_{ext}(q) = \frac{4\pi}{q^2}$$

Da cui possiamo usare la funzione ε per trovare il potenziale totale all'interno del conduttore:

$$\phi(q) = \frac{\phi_{ext}(q)}{\varepsilon(q)} \propto \frac{4\pi}{q^2 \left(1 + \frac{k_s^2}{q^2}\right)} = \frac{4\pi}{\alpha^2 + q^2}$$

Normalizzando con il volume Ω otteniamo:

$$\phi(q) \propto \frac{4\pi}{\Omega(q^2 + \alpha^2)}$$

Anti-transformando si ottiene lo schermo di Thomas-Fermi

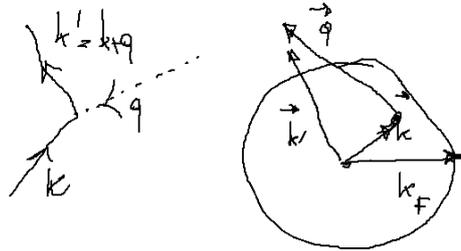
$$\phi(r) = \frac{e}{r} e^{-k_s r}$$

Abbiamo uno schermo abbastanza piccolo. Il sistema resta con dei campi elettrici nelle vicinanze dell'impurezza. Quando si scoprì la fusione fredda le persone ritenevano che questo potesse servire a spiegare il fenomeno. Se due deuteri sono vicini 1 Armstrong non riescono comunque a fondere.

Per avere un'ampiezza di tunnelling apprezzabile dovrebbero raggiungere vicinanze pari al decimo di Armstrong.

La cosa su cui possiamo agire è la densità degli stati, possiamo arrivare a schermare su distanze molto piccole. Tuttavia bisogna sempre considerare che i sistemi metallici sono prodotti da reticoli finiti, pertanto tutte queste trattazioni, che nascono dall'approssimazione del continuo, non valgono più per distanze inferiori al passo reticolare. Se abbiamo una banda tridimensionale metallica, la densità degli stati è inversamente proporzionale all'interazione tra atomi.

La funzione di Lindard invece è più complicata da calcolare e non può essere trascurata la particolare geometria della superficie di Fermi. In seguito sono mostrate due particolari geometrie di scattering dominanti.



2.3 Interazione elettrone-fonone

Facciamo il caso unidimensionale dell'interazione fonone-elettrone. Questa interazione significa che abbiamo una probabilità di far passare l'elettrone da uno stato all'altro sugli atomi j e $j + 1$:

$$t b_{j+1}^\dagger b_j \quad t b_j^\dagger b_{j+1}$$

L'hamiltoniana è

$$H = - \sum_j t(j, j+1) \left[b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j \right]$$

$$d = x_{j+1} - x_j = \frac{L}{N}$$

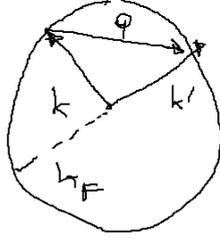


Figura 2.5: Questo ha un enorme sezione d'urto perché la differenza di energia tra i due k e k' è piccolissimo (sta al denominatore). Nel caso di Thomas-Fermi tutta la superficie di fermi contribuisce, mentre per q finito esistono solo particolari topologie di scattering che dominano il processo (come quella n figura). Per $q \gg k_f$ lo schermo si ammazza perché non ho più nulla.

$$b_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikx_j} b_k^\dagger \quad b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikx_j} b_k$$

$$H = - \sum_j t \left[\frac{1}{N} e^{-ikx_j} b_k^\dagger \sum_{k'} e^{ik'x_{j+1}} b_{k'} + \frac{1}{N} \sum_k e^{-ikx_{j+1}} b_k^\dagger \sum_{k'} e^{ik'x_j} b_{k'} \right]$$

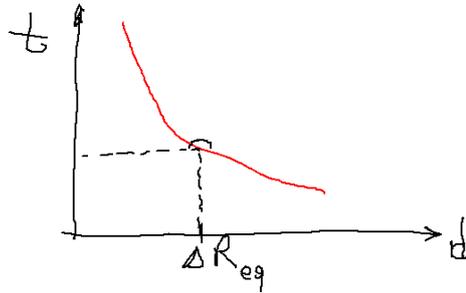
Da cui si ottiene

$$H = - \sum_k \left[e^{ikd} b_k^\dagger b_k + e^{-ikd} b_k^\dagger b_k \right]$$

$$H = \sum_k \varepsilon_k b_k^\dagger b_k \quad \varepsilon_k = -2t \cos kd$$

Abbiamo ritrovato la curva di dispersione del modello a tight-binding, questa è la parte imperturbata, dispersione del sistema elettronico. Dove il termine di hopping è dato dalla sovrapposizione delle funzioni d'onda mediate dal potenziale di interazione:

$$t(j, j+1) = \langle \phi_A(r - R_{j+1}) | V_{j,j+1} | \phi_A(r - R_j) \rangle$$



Se approssimiamo l'hopping attorno al punto d'equilibrio possiamo scriverlo come:

$$t(j, j+1) = t^{(0)} + t^{(1)}(u_{j+1} - u_j)$$

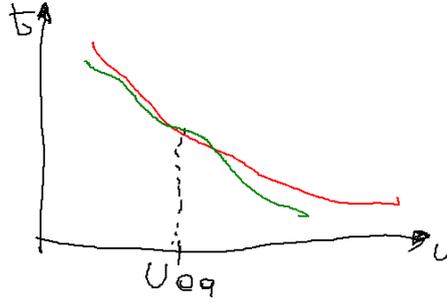
Stiamo approssimando localmente con una retta questo termine. Questo termine va inserito nella hamiltoniana e fanno apparire i termini di creazione di fononi. L'hamiltoniana del sistema era:

$$H = - \sum_j t(j, j+1) \left[b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j \right]$$

Passando in coordinate di Fourier, arriva l'hamiltoniana:

$$H = \sum_k \varepsilon_k b_k^\dagger b_k \quad \varepsilon_k = -2t \cos kd$$

Dove t è l'interazione tra i due atomi



$$t(j, j+1) = t_0 + t_1(u_{j+1} - u_j)$$

Andiamo adesso a mettere nell'hamiltoniana il termine t_1 , e vediamo come diventa l'hamiltoniana di interazione.

$$H_I = - \sum_j t_1(u_{j+1} - u_j) \left[b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j \right] \quad (2.54)$$

$$u_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q Q_q e^{iqR_j} \quad (2.55)$$

$$u_{j+1} - u_j = \sum_q \underbrace{\sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_q}} (a_q + a_{-q}^\dagger) (e^{iqd} - 1) e^{iqR_j}}_{B_q} \quad (2.56)$$

Vediamo il primo termine

$$\begin{aligned} - \sum_j t_1(u_{j+1} - u_j) b_j^\dagger b_{j+1} &= - \sum_j t_1 \sum_q B_q e^{iqR_j} \frac{1}{N} \sum_{k'} e^{-ik'R_j} b_{k'}^\dagger \sum_k e^{ikR_j} b_k \\ &= - \frac{1}{N} t_1 \sum_q B_q \sum_{k k'} \underbrace{\sum_j e^{i(q-k'+k)R_j}}_{N\delta} e^{ikd} b_{k'}^\dagger b_k \end{aligned}$$

Da cui otteniamo

$$= -t^1 \sum_j B_q e^{ikd} b_{k+q}^\dagger b_k = -t \sum_{q k} \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_q}} \left[e^{i(k+q)d} - e^{ikd} \right] b_{k-q}^\dagger b_k (a_q + a_{-q}^\dagger)$$

Facendo la stessa cosa per il secondo termine si ottiene

$$\sum_j t_1(u_{j+1}-u_j)b_{j+1}^\dagger b_j = -t \sum_{qk} \sqrt{\frac{\hbar}{2mN\omega_q}} \left[-e^{-i(k+q)d} + e^{-ikd} \right] b_{k+q}^\dagger b_k (a_q + a_{-q}^\dagger)$$

L'interazione fonone-elettrone è

$$H_{el-ph} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kq} g(k, q) b_{k+q}^\dagger b_k (a_q + a_{-q}^\dagger)$$

$$g(k, q) = it_1 \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_q}} [\sin kd - \sin(k-q)d]$$

L'espressione di $g(k, q)$ è derivata dalla fisica specifica, nella maggior parte dei casi viene fatta l'approssimazione

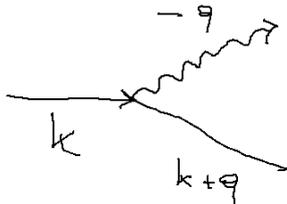
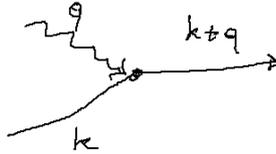
$$g(k, q) \approx g \quad \text{costante}$$

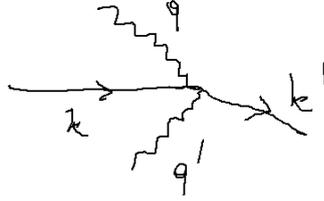
Questa dipendenza può essere critica da q , e dipende dal sistema fisico.

$$H_{el-ph} = \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_q \rho_q (a_q + a_{-q}^\dagger) \quad (2.57)$$

Che tipo di operatori appaiono in questa hamiltoniana?

$$b_{k+q}^\dagger b_k a_q \quad b_{k+q}^\dagger b_k a_{-q}^\dagger \quad (2.58)$$





Se avessimo espanso al secondo ordine avremo avuto termini del tipo:

$$b_k^\dagger b_k a_q a_{-q}$$

Abbiamo solo due tipi di vertici. Questa hamiltoniana è sufficiente per fare la superconduttività, tuttavia ci vuole un bel po'. g contiene tutta la fisica dell'accoppiamento. Questi diagrammi creeranno scattering. Più è grosso g più fa scattering. Quando avremo la superconduttività g sarà la chiave della superconduttività. Paradossalmente se g è piccolo (un ottimo metallo) avremo un pessimo superconduttore.

Un metallo molto buono avrà poco scattering, e questo avrà temperatura molto piccola.

2.3.1 Resistività dei metalli

Applichiamo l'interazione fonone-elettrone per studiare la resistività normale di un metallo.

L'argomento più semplice possibile è quello degli elettroni liberi. Questo tipo di argomento fu fatto da Drude. Questo è possibile grazie al teorema di Bloch.

L'idea della legge di Ohm è che c'è una legge di scattering che crea la legge di Ohm:

$$J = \sigma E$$

Questa si interpreta microscopicamente

$$J_x = -neV_x = \sigma E_x$$

Ora scriviamo la versione elementare dell'equazione di Boltzman:

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} = -\frac{e}{m} E_x \quad \text{Legge di Newton}$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} = -\frac{v_x}{\tau} \quad \text{Legge di scattering}$$

Possiamo scrivere il bilancio:

$$\left. \frac{\partial v_x}{\partial t} \right|_{\text{campo}} + \left. \frac{\partial v_x}{\partial t} \right|_{\text{scattering}} = 0$$

$$-\frac{e}{m} E_x - \frac{v_x}{\tau} = 0 \quad v_x = -\frac{e\tau}{m} E_x$$

Da cui ricaviamo la legge di Drude.

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

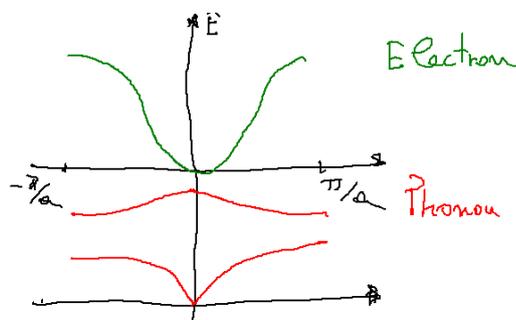
Questa legge è molto brutta, perché per il rame a temperatura ambiente si osserva:

$$\sigma = 6 \cdot 10^5 (\Omega\text{cm})^{-1} \quad n = 8.5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3} \quad \tau = 2 \cdot 10^{-14} \text{ s} \quad v_f = 1.6 \cdot 10^8 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$$

Se calcoliamo quanto spazio è capace di fare un elettrone che è

$$v_f\tau = 30 \text{ nm}$$

In realtà il meccanismo quantistico è diverso: abbiamo i fononi, i fononi vivono su una banda di Brillouin



Bisogna conservare momento e energia dello scattering, tuttavia siccome le energie dei fononi sono ordini di grandezza più piccole degli elettroni posso considerare lo scattering elastico.

Abbiamo che

$$E_F \approx 4 \text{ eV} \quad v_F \approx 10^8 \frac{\text{cm}}{\text{s}} \quad \hbar\omega_D \approx 0.01 \text{ eV} \quad v_s = 10^6 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$$

In questo senso possiamo pensare allo scattering quasi elastico:

$$P(k, k') d\Omega = \frac{2\pi}{\Omega} |\langle k|V|k' \rangle|^2 d\Omega$$

L'equazione generale dello scattering è data dal seguente sistema

$$\begin{cases} \frac{\hbar^2(k')^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \hbar\omega_q \\ k' = k + q + G \end{cases}$$

Adesso entriamo nel microscopico (teoria di Sommerfeld). In Figura 2.6 è mostrato il processo elementare di scattering. In generale questo coinvolge due stati della superficie di Fermi, l'elettrone che interagisce deve trovarsi all'interno della superficie, quello in cui viene mandato dopo lo scattering deve essere all'esterno (Figura 2.7).

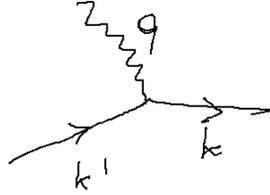


Figura 2.6: Vertice di scattering elettrone-fonone.

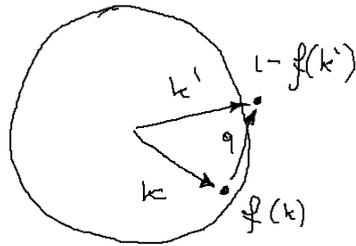


Figura 2.7: Scattering fonone-elettrone attraverso la superficie di Fermi.

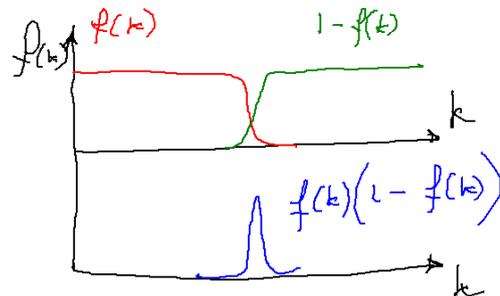


Figura 2.8: Probabilità dello scattering legata all'occupazione fermionica della superficie di Fermi.

La probabilità che questo processo avvenga è data dal prodotto dai valori di aspettazione dell'occupazione degli elettroni nella sfera di Fermi (Figura 2.8).

Se facciamo il limite di risposta lineare è

$$\sigma = \lim_{E \rightarrow 0} \frac{J(E)}{E}$$

Questa è la risposta lineare. L'introduzione di una perturbazione (campo elettrico esterno) sul metallo modifica la distribuzione degli elettroni, rappresentata dalla distribuzione di fermi $f(\vec{k}, r)$. Il numero di elettroni per unità di volume è dato da:

$$\frac{2}{8\pi^3} f(\vec{k}, r) d^3k d^3r$$

Dove 2 è lo spin, $8\pi^3$ è un fattore di integrazione per sistemi tridimensionali. Quando inseriamo il campo vogliamo andare in condizione di stazionarietà. L'equazione di Boltzmann rappresenta la condizione di stazionarietà³.

Vediamo in che modo $f(k, r)$ dipende dal tempo. Gli elettroni nel metallo non stanno fermi, hanno una dinamica interna (E_k è la dispersione):

$$v_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_k$$

La velocità e il momento sono la stessa cosa solo in bande paraboliche. Inseriamo un campo elettrico

$$\begin{cases} v_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_k \\ \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar} \left[E - \frac{1}{c} \vec{v}_k \times \vec{B} \right] \\ \vec{k} \rightarrow \vec{k}' \end{cases}$$

Il motivo per cui sono così valgono nel caso di particelle libere. In un solido la dispersione in generale può essere qualunque. Invece di avere degli elettroni che hanno una relazione di dispersione parabolica, assorbiamo l'interazione degli atomi ridefinendo una particella singola non interagente che si comporta in una dispersione non parabolica, la massa efficace è un elemento di questo riassorbimento. Le leggi del moto sono in dk/dt .

Il principio di stazionarietà sarà:

$$\left. \frac{\partial f(k, r)}{\partial t} \right|_{diff} + \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{scat} = 0 \quad (2.59)$$

La funzione di fermi imperturbata è

$$f_0(k) = \frac{1}{e^{(E_k - E_f)/k_b T} + 1}$$

Sia

$$g(k, r) = f(k, r) - f_0(k, r)$$

³Questo è il motivo per cui è diversa in ogni libro: non è un'equazione fondamentale, ma solo una condizione di stazionarietà.

A questo punto possiamo scrivere formalmente il problema. Scriviamo la corrente in modo quantistico. Partiamo dall'equazione classica:

$$\vec{J} = nq\vec{v}$$

Dove n è la densità di elettroni. Siccome la densità di elettroni da un punto di vista quantistico dipende dal vettore d'onda \vec{k} attraverso la distribuzione di Fermi, occorre aggiungere un integrale.

$$\vec{J} = -e \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} f(\vec{k}) \vec{v}_k$$

In condizioni di assenza di campo elettrico la distribuzione di fermi è simmetrica, e l'integrale da zero. Pertanto possiamo sottrarre all'integrando la distribuzione di equilibrio $f_0(\vec{k})$.

$$\vec{J}(r) = -e \frac{2}{8\pi^3} \int d^3k \vec{v}_k [f(k, r) - f_0(k, r)] \quad (2.60)$$

La differenza tra le due funzioni di Fermi la chiamiamo $g(k, r)$, che deve dare un'asimmetria nel sistema. Dobbiamo scrivere $g(k, r)$ in una forma utile.

Cerchiamo di calcolare Δf dovuta al drift:

$$\Delta f_{drift} = f(\vec{k}, \vec{r}, t + \Delta t) - f(\vec{k}, \vec{r}, t)$$

Se al tempo $t + \Delta t$ abbiamo uno stato k, r , al tempo t avremo uno stato $k' = k - \Delta k$.

$$f(k, r, t + \Delta t) = f\left(k - \frac{dk}{dt}\Delta t, r - v_k\Delta, t, t\right)$$

Possiamo espandere questa equazione:

$$\begin{aligned} f(k, r, t) &= f(k, r, t) - \nabla_k f \frac{dk}{dt} \Delta t + \dots \\ -\nabla_k F \frac{dk}{dt} &= \frac{e}{\hbar} [\nabla_k f_0 + \nabla_k g] \left[E + \frac{1}{c} \vec{v}_k \times \vec{B} \right] \end{aligned}$$

Questo diventa

$$-\nabla_k F \frac{dk}{dt} = e \frac{\partial f_0}{\partial E_k} \vec{v}_e \cdot \vec{E}$$

Adesso facciamo il *relaxation time approximation*

$$\frac{\partial g}{\partial t} = -\frac{g(k)}{\tau}$$

Adesso la condizione di stazionarietà è

$$\frac{\partial f}{\partial t}_{drift} + \frac{\partial f}{\partial t}_{scattering} = 0$$

Otteniamo

$$g(k) = e\tau \left(\frac{\partial f_0}{\partial E_k} \right) \vec{v}_k \cdot \vec{E}$$

Un altro modo per modificare la funzione è

$$f(k) = f^0(k) + \frac{e\tau}{\hbar} \frac{\partial f_0}{\partial E_k} \nabla_k E(k)$$

Questo si può riscrivere come:

$$f^0\left(k + \frac{e\tau}{\hbar} \vec{E}\right)$$

Quindi stiamo espandendo il sistema come se traslassimo l'intera funzione di Fermi. Scrivendo l'equazione di Boltzman per la resistività elettrica, l'oggetto del calcolo è la deviazione della superficie di fermi:

$$g(k) = e\tau \left(\frac{\partial f_0}{\partial E_k} \right) \vec{v}_k \cdot \vec{E}$$

Questa g è la asimmetria che genera la corrente

$$J(r) = -e \frac{2}{8\pi^3} \int v_k g(k) d^3k$$

Se sostituiamo la formula della $g(k)$ si ottiene la struttura:

$$J(r) = -\frac{e^2}{4\pi^2} \int v_k \tau \frac{\partial f_0}{\partial E_k} (\vec{v}_k \cdot \vec{E}_k) d^3k = \sigma \vec{E}$$

Adesso tutta l'azione avviene dalle vicinanze della sfera di fermi. Questa formula è molto più sofisticata della formula di Drude per la conduzione.

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*}$$

Supponiamo di avere bande paraboliche.

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad \vec{v}_k = \frac{\hbar \vec{k}}{m^*}$$

$$\sigma = \frac{J_x}{E_x} = -\frac{e^2 \hbar^2}{4\pi^4 m^{*2}} \int \tau \underbrace{\frac{\partial f_0}{\partial E_k}}_{-\delta(E-E_f)} k_x^2 d^3k$$

$$\sigma = \frac{ne^2\tau_f}{m^*} \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)$$

Quindi la relazione di Drude può essere ricavata da quella di Sommerfield per bande paraboliche.

$$\sigma \sim \int v_k^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial E_k} \right) \tau \sim N(E_f) \langle v_f^2 \rangle \tau$$

Nel caso del metallo normale abbiamo

$$N(E_F) \sim k_f \quad \langle v_f^2 \rangle \sim k_f^2 \quad \sigma \sim k_f^3 \sim n(E_f)$$

Nel grafene però la dispersione è a croce e la dispersione è lineare:

$$v_k = \text{cost} \quad E(k) \propto k_f$$

Quindi non vale più la legge di Drude, ma bisogna ricalcolare la conducibilità usando l'espressione di Sommerfield completa.

2.3.2 Modello a diffrazione della resistività

La diffrazione ci da una misura del tasso di disordine di un solido, dalle deviazioni dal teorema di block. Ora vogliamo legare la teoria della resistività con la quantità di disordine. L'esperienza dei metalli semplici è che, se il metallo è molto puro va come una legge di potenza del tipo T^5 . In presenza di impurezze esiste una resistività ρ_0 .

Adesso usiamo la formula di Drude:

$$\rho \sim \frac{m}{ne^2\tau_f}$$

E andiamo a capire chi è τ_f . Lo scattering è

$$\frac{1}{\tau_f} = \int_{S_F} P(k \rightarrow k')(1 - \cos\theta) dS'_f$$

Il tempo di scattering è pari al tempo medio con cui un elettrone perde orientamento per via dei processi di scattering, che è pari all'inverso del rate di scattering. Gli urti più rilevanti sono quelli che cambiano maggiormente la direzione. θ è l'angolo di scattering tra k e k'

$$k' = k + q \quad |k| = |k'| = |k + q| = k_f$$

$$dS'_f = 2\pi k_f^2 \sin\theta d\theta$$

Ora dobbiamo scrivere l'elemento di matrice della teoria dello scattering:

$$P(k \rightarrow k') dS'_f = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k' | v | k \rangle|^2 \frac{1}{2} D(E_f) \frac{2\pi k_f^2 \sin\theta d\theta}{4\pi k_f^2}$$

Il termine $\frac{1}{2}$ davanti a $D(E_f)$ è dovuto allo spin, perché lo spin si conserva. Il $D(E_f)$ per il termine seguente è la densità degli stati corrispondente all'angolo solido in cui possiamo andare dS'_f .

Mettiamo dentro tutti questi pezzi nella nostra formuletta. Il nostro stato è l'onda piana

$$|\vec{k}\rangle = \Omega^{-\frac{1}{2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad D(E_F) = \frac{3n\Omega}{2E_F}$$

$$\rho = \frac{3\pi m\Omega}{8e^2\hbar E_f} \int_0^2 \left| \langle \vec{k} + q | v | \vec{k} \rangle \right|^1 x^3 dx \quad x = \frac{q}{2k_f}$$

Andiamo a vedere l'elemento di matrice:

$$\langle \vec{k} + \vec{q} | v | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_n \int e^{-i(\vec{k}+\vec{q})\cdot\vec{r}} v(\vec{r} - \vec{R}_n) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d^3r$$

Questo termine può essere riscritto come

$$\frac{1}{\Omega} \sum_n e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_n} \int e^{-i(k+q)(r-R_n)} v(r - R_n) e^{ik(r-R_n)} d^3r$$

Adesso possiamo riscriverla in questo modo:

$$\frac{1}{N} \sum_n e^{-iqR_n} \cdot \frac{1}{\Omega_0} \int e^{-i(k+q)\vec{r}} v(r) e^{ikr} d^3r$$

Con Ω_0 volume della cella unitaria. Il primo termine è il fattore di struttura, mentre il secondo è la trasformata di Fourier del potenziale che contiene la natura dello scattering

$$\langle \vec{k} + \vec{q} | v | \vec{k} \rangle = S(\vec{q}) v(\vec{q})$$

Nel caso di solido periodico $S(\vec{q})$ sono i picchi di Bragg, che sono i vettori del reticolo reciproco. Quindi lo scattering può avvenire solo in quelle direzioni, e poiché sono infinitesimi lo scattering è irrilevante. quindi non fanno scattering. Nel caso di sistemi disordinati la $S(q)$ ci da il disordine, e la conducibilità dipende dal fattore di struttura.

Per la resistività dei metalli possiamo chiederci come i fononi modificano il fattore di struttura.

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

Consideriamo un singolo fonone tipico di vettore d'onda \vec{Q} e frequenza $\omega(\vec{q})$

$$\vec{u}(R_j^0) = \vec{u}_0 e^{i\vec{Q} \cdot R_j^0}$$

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_j e^{-i\vec{q} R_j^0} e^{-i\vec{q} u(R_j^0)} \approx \frac{1}{N} e^{-i\vec{q} \vec{R}_j} [1 - i\vec{q} \cdot \vec{u}(R_j^0) + \dots]$$

Facciamo l'approssimazione di singolo scattering; Questo ci da

$$\begin{aligned} \vec{u}(R_j^0) &= \frac{1}{N} \sum_j e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_j^0} [1 - i\vec{q} \vec{u}_0 e^{i\vec{Q} \cdot \vec{R}_j}] = \\ &= \frac{1}{N} N \delta_{\vec{q},0} + \frac{iN}{N} \vec{q} \cdot \vec{u}_0 \delta_{\vec{q}-\vec{Q},0} \end{aligned}$$

$$\rho \sim \int_0^{2k_f} |v(\vec{Q})|^2 |\vec{Q} \cdot \vec{u}| Q^3 dQ$$

Facendo i conti si può vedere effettivamente che

$$\rho \sim T^5$$

Studiamo come lo scattering è modificato dal disordine. Questa è la resistività normale.

La resistività normale è una proprietà della superficie di fermi, con uno spessore al più $\hbar\omega_q$. Da questa storia non si capisce di come si riesca a creare una gap.

2.4 Interazione attrattiva mediata da fononi

I fononi possono avere un interazione attrattiva? Questa domanda è interessante soprattutto alla luce dell'effetto isotopico, che ci dice che $T_c \sim M^{-\frac{1}{2}}$. L'isotopo non cambia assolutamente nulla con le caratteristiche elettroniche, La frequenza fononica va come:

$$\omega \sim \sqrt{\frac{k}{M}}$$

Allora sembra che la temperatura critica sia collegata alla frequenza dei fononi, invece T_c è circa cento volte inferiore della frequenza tipica fononica. Partiamo dal primo elemento incoraggiante.

Forse i fononi formano delle coppie. Se abbiamo un elettrone in un reticolo, osserveremmo localmente una distorsione, questo può polarizzare il reticolo. Questo si chiama polarone. Il polarone ha varie varianti. L'elettrone cammina e polarizza il reticolo dinamico. Questo effetto può essere descritto usando la self-energia. Tuttavia la self-energia predice che l'elettrone sia rallentato nel suo modo a causa della polarizzazione del reticolo. Questo fa sì che l'elettrone diventi una quasi-particella, con un tempo di vita finito. Se due elettroni sono sullo stesso sito, guadagnano un'energia $-\Delta$ grazie ai polaroni. Questo fenomeno tende a distruggere lo stato di block (che richiede elettroni delocalizzati) e creare un isolante di Mott.

Questo effetto è detto di *bipolarone*; il problema di questo fenomeno è che gli elettroni coinvolti sono fermi e non conducono corrente. L'altro problema del bipolarone è che è un effetto molto debole, nonostante lo schermo di Thomas-Fermi, la repulsione Coulombiana è nettamente superiore.

Il bipolarone è un effetto di statica. L'attrazione potrebbe avvenire in una particolare regione a $q \neq 0$, e quindi essere un effetto di dinamica. La coppia BCS è un effetto di dinamica, dovuto alla *retarded interaction*. Un elettrone che si muove su un reticolo tende a polarizzarlo. Tuttavia la polarizzazione indotta sugli atomi si propaga alla velocità del suono, molto minore della velocità di Fermi dell'elettrone. Quando il secondo elettrone passa nel reticolo polarizzato, l'elettrone che ha causato la polarizzazione si è allontanato parecchio. Il secondo elettrone non risente quindi della repulsione coulombiana, ma trova il reticolo polarizzato, e viene accelerato. Quindi i fononi (reticolo ionico) creano un'attrazione tra due elettroni che viaggiano a vettori d'onda k e $-k$.

La descrizione dettagliata di questo fenomeno è molto complessa, e difficilmente controllabile. Questo è come si pensa che avvenga la superconduttività.

2.4.1 Interazione elettrone-fonone nello spazio di Fourier

Il potenziale di cui risentono due elettroni vale:

$$V_b(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \quad \varepsilon(q) = 1 + \frac{k_s^2}{q^2}$$

Da cui si ottiene lo schermo di Thomas-Fermi:

$$V(q) = \frac{V_b(q)}{\varepsilon(q)} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_s^2}$$

Da cui il potenziale totale diventa:

$$V(r) = \frac{e^2}{r} e^{-\frac{r}{r_{tf}}}$$

La dipendenza da ω degli elettroni è piccola, per questo non abbiamo specificato la dipendenza da ω degli elettroni. I fononi invece dipendono molto da ω e poco da q .

Vediamo la risposta di un oscillatore armonico. Applichiamo una forzante attraverso un campo elettrico oscillante.

$$E(\vec{r}, t) = E_0 \cos(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t) = \Re \left[E_0 e^{-i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right]$$

Come detto, l'oscillatore armonico non dipende fortemente da \vec{q} , approssimiamo:

$$\vec{q} \cdot \vec{r} \approx \text{cost}$$

Per piccoli q la forza che agisce sul sistema con costante elastica f è:

$$F = -fr \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{f}{m}}$$

L'equazione del moto completa (aggiungendo un termine di attrito γ) è:

$$\frac{d^2r}{dt^2} = -\omega_0^2 r - \frac{e}{m} E_0 e^{-i\omega t} - \gamma \frac{dr}{dt} \quad (2.61)$$

Passando in trasformata di Fourier si risolve l'equazione

$$r(t) = r_0(\omega) e^{-i\omega t} \quad (2.62)$$

Sostituendo la (2.62) dentro la (2.61) otteniamo la soluzione per la posizione dell'oscillatore. La polarizzazione può essere ottenuta direttamente dal displacement r :

$$p(t) = -er(t) = \alpha(\omega) E_0 e^{-i\omega t}$$

Da cui si ottiene la polarizzabilità α .

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}$$

Il grafico di α è riportato in Figura 2.9

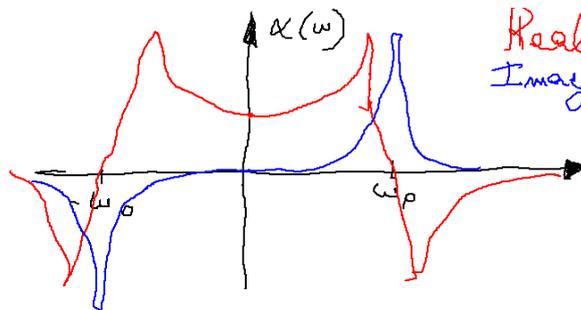


Figura 2.9: Grafico della polarizzabilità, parte reale e immaginaria.

Se perturbiamo un oscillatore a frequenza minore della frequenza caratteristica lo polarizziamo dal verso giusto, se invece forziamo a frequenza maggiore otteniamo una polarizzazione opposta (per via dell'inerzia).

Per fononi realistici avvengono cose un po' più sofisticate. I cristalli ionici sono i più interessanti per studiare la risposta (Figura 2.10)

Per semplicità si grafica la funzione ε ottenuta dalla polarizzabilità α nel seguente modo:

$$\frac{\varepsilon - 1}{4\pi} = \alpha \quad (2.63)$$

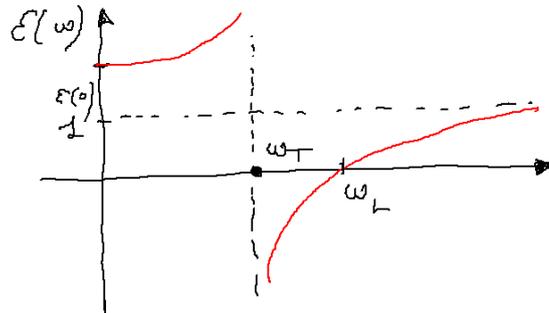


Figura 2.10: Risposta in polarizzazione dei reticoli ionici.. La funzione ε è riportata nell'equazione (2.63)

Ci interessa la parte di alta frequenza dove questo segno negativo può essere il prologo dell'attrazione:

$$\varepsilon_{ion}(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}$$

La frequenza di plasma ω_p è la frequenza di rilassamento delle onde di densità in mezzi carichi.

Lo schermo fononico è ottenuto dalla relazione:

$$\omega^2(q) = \frac{\omega_p^2}{\varepsilon(q, \omega)}$$

Dobbiamo mettere tutto insieme. La funzione dielettrica totale del metallo è fatta da elettroni di conduzione, per i quali abbiamo $\varepsilon_{el}(q, \omega)$ e dagli ioni del reticolo. Come si combinano? Immaginiamo di mettere un campo esterno:

$$\phi_a(r, t) = \phi_a(q, \omega) \cos(qr - \omega t) \quad \text{Potenziale esterno} \quad (2.64)$$

Il potenziale polarizza gli elettroni a cui rispondono con Thomas-Fermi, con un potenziale di risposta ϕ_e , e gli ioni, con un potenziale ϕ_i

$$\phi_e(r, t) = \phi_e(q, \omega) \cos(qr - \omega t) \quad \phi_i(r, t) = \phi_i(q, \omega) \cos(qr - \omega t) \quad (2.65)$$

Da cui il potenziale totale finale è:

$$\phi = \phi_a + \phi_e + \phi_i$$

Sia elettroni che reticolo risentono solo del potenziale totale ϕ . Dobbiamo quindi scrivere un'equazione di auto-consistenza. Ricordiamo chi è la funzione di risposta ε :

$$\varepsilon = \frac{\phi_{ext}}{\phi}$$

Prendiamo il punto di vista elettronico; il potenziale esterno per gli elettroni è quello esterno ϕ_a più quello di risposta dei fononi ϕ_i :

$$\varepsilon_{el}(q, \omega)\phi(q, \omega) = \phi_a(q, \omega) + \phi_i(q, \omega)$$

Lo stesso discorso per gli ioni:

$$\varepsilon_{ion}(q, \omega)\phi(q, \omega) = \phi_a(q, \omega) + \phi_e(q, \omega)$$

Se consideriamo la risposta totale del sistema vale:

$$-\varepsilon(q, \omega)\phi(q, \omega) = -\phi_a(q, \omega)$$

Ora sommiamo tutti i contributi:

$$(\varepsilon_{el} + \varepsilon_{ion} - \varepsilon)\phi = \phi_a + \phi_i + \phi_e = \phi \quad (2.66)$$

Da cui otteniamo:

$$\varepsilon(q, \omega) = \varepsilon_{el}(q, \omega) + \varepsilon_{ion}(q, \omega) - 1 \quad (2.67)$$

Abbiamo ottenuto lo scudo totale:

$$\varepsilon_{el}(q, \omega) \approx \varepsilon_{el}(q, \omega = 0) \approx 1 + \frac{k_s^2}{q^2} \quad (2.68)$$

$$\varepsilon_{ion}(q, \omega) \approx \varepsilon_{ion}(q = 0, \omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (2.69)$$

Dove le approssimazioni sono giustificate dai seguenti valori numerici:

$$qv_{ion} \ll \omega \ll qv_f \quad v_f \sim 10^8 \text{ cm/s} \quad v_{ion} \sim 10^5 \text{ cm/s}$$

Pertanto lo scudo completo ha la seguente espressione analitica:

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 + \frac{k_s^2}{q^2} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \approx \left(1 + \frac{k_s^2}{q^2}\right) \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right)$$

Il potenziale di schermo tra due elettroni adesso è

$$V(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 \varepsilon(q, \omega)} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_s^2} \left(\frac{\omega^2}{\omega^2 - \omega_p^2}\right)$$

$$q = k - k' \quad \hbar\omega = E_k - E_{k'}$$

Abbiamo

$$\omega_p \leq \omega_d \ll E_F$$

$$\hbar\omega = E_k - E_{k'} < \hbar\omega_D$$

Può avvenire che

$$V(q) < 0$$

Se abbiamo lo schermo dinamico può succedere che per effetto dell'inerzia degli ioni, la reazione del reticolo sia ritardata rispetto allo stimolo del potenziale esterno, generando una reazione attrattiva. Potrebbero esserci altro tipo di interazioni, come eccitazioni di spin eccitoniche.

Capitolo 3

Coppia di cooper

Abbiamo visto nel capitolo precedente che può esistere una regione nello spazio ωq in cui due elettroni si accoppiano.

Prendiamo il mare di fermi e aggiungiamo due elettroni al sistema pieno, dobbiamo metterli fuori dalla superficie di fermi. Questi due elettroni li assumiamo debolmente interagenti e vogliamo vedere cosa succede.

Studiamo una coppia di particelle:

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + V(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$$

Definiamo

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \quad R_{cm} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$
$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

Definiamo il moto nel centro di massa:

$$P = M \frac{d\vec{R}_{cm}}{dt}$$
$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r)$$

Per una coppia di elettroni abbiamo:

$$H_{el} = -\frac{\hbar^2}{4m_e} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{m} \nabla_r^2 + V(r)$$

La funzione d'onda del centro di massa vale:

$$U(R) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad E_U = \frac{\hbar k^2}{4m}$$

Da cui l'equazione di schroedinger per il moto relativo è

$$\left[-\frac{\hbar^2}{m} \nabla_r^2 - V(r) \right] u(r) = E u(r)$$

Abbiamo un piccolo potenziale attrattivo che, immaginiamo, agisce nelle vicinanze della superficie di Fermi.

Ci conviene anche che:

$$\vec{k}_1 = -\vec{k}_2 \quad \longrightarrow \quad \vec{K} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2 = 0$$

Questo è lo stato fondamentale per il moto collettivo (del centro di massa). Assumiamo che l'elettrone abbiano spin opposto in un singoletto. La funzione d'onda totale deve essere globalmente antisimmetrica. Abbiamo due opzioni.

$$e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} \pm e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_2}$$

$$e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \pm e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \begin{cases} 2 \cos \vec{k} \cdot \vec{r} & \uparrow\downarrow \\ -2i \sin \vec{k} \cdot \vec{r} & \uparrow\uparrow \end{cases}$$

Si preferisce lo stato antisimmetrico in spin perché la funzione d'onda è diversa da zero per r piccoli, e quindi favorisce l'attrazione.

La superficie di Fermi implica che $|\vec{k}| > k_f$.

Per questo stato di singoletto possiamo scrivere la funzione d'onda come sovrapposizione di onde piane.

$$u(r) = \sum_{|\vec{k}| > k_f} a(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad a(\vec{k}) = 0 \text{ se } |\vec{k}| > k_f$$

Calcoliamo gli elementi di matrice della Hamiltoniana

$$\int d\vec{r} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \left[-\frac{\hbar^2}{m} \nabla^2 + V(r) \right] \sum_{\vec{k} > k_f} a(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} H \sum_{\vec{k} > k_f} a(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

Grazie allo sviluppo in onde piane l'energia cinetica è diagonale alla base scelta, con energia pari a $2E_k$:

$$E_k = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

$$\int d\vec{r} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \sum_{\vec{k} > k_f} a(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} 2E_k + \int d\vec{r} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} V(r) \sum_{\vec{k} > k_f} a(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = E a(\vec{k}')$$

$$2E_{k'} a(k') + \sum_{\vec{k} > k_f} \langle k' | V | k \rangle a(k) = E a(k')$$

$$(2E_k - E) a(k') + \sum_{\vec{k} > k_f} \langle k | V | k' \rangle a(k) = 0$$

$$V_{k k'} = V(q)$$

E assumiamo che l'interazione sia attrattiva per una piccola shell:

$$\langle \vec{k} | V | \vec{k} \rangle = -V \quad V > 0$$

Per

$$E_{k'} \leq E_k + \Delta \quad \Delta \sim \hbar \omega_D$$

Questa ipotesi corrisponde a quanto mostrato in Figura 3.1.

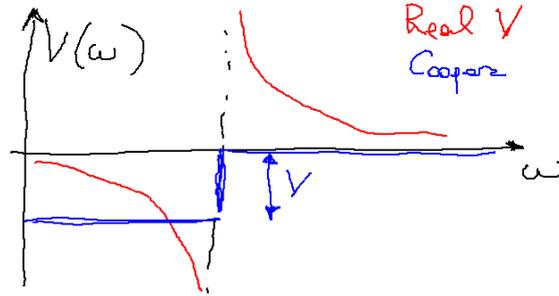


Figura 3.1: Schema dell'approssimazione del potenziale di interazione elettrone-elettrone in un reticolo fononico nella teoria di Cooper.

Con questo schema otteniamo:

$$(2E_k - E)a(k) = V \sum_{k'} a(k')$$

$$a(k) = \frac{V}{2E_k - E} \sum_{k' > k_f} a(k') \quad (3.1)$$

L'equazione (3.1) è un'equazione di auto-consistenza in $a(k)$. Vogliamo capire se esiste uno stato legato del sistema (uno stato ad energia più bassa dell'energia di Fermi).

I problemi che questa teoria tenta di risolvere sono i seguenti:

- Esistenza delle coppie di Cooper, stato legato ($e^- e^-$).
- Nessuna teoria della perturbazione a singolo elettrone.
- $T_c \sim 0-20$ K, mentre i fononi vanno da $\hbar\omega \sim 0-1000$ K gli elettroni $E_f \sim 50000$ K. C'è un fattore 1000 tra la frequenza fononica e la temperatura critica.

Cerchiamo di risolvere ora tutti questi problemi a partire dall'equazione (3.1).

$$a(k) = \frac{V}{2E_k - E} \sum_{k'} a(k')$$

In realtà non tutti i k entreranno in gioco in questa espressione, ma solo quelli attorno alla superficie di Fermi. Estendiamo la somma solo per momenti compresi tra:

$$k_f \leq |\vec{k}| \leq k_f + \Delta$$

Per risolvere l'equazione di auto-consistenza occorre sommare ambo i membri su tutti i k permessi:

$$\sum_{k_f \leq k \leq k_f + \Delta} a(k) = \sum_{k_f \leq k \leq k_f + \Delta} \frac{V}{2E_k - E} \sum_{k_f \leq k' \leq k_f + \Delta} a(k')$$

Questo ci permette di eliminare gli autovettori $a(k)$ e arrivare all'equazione agli autovalori:

$$\frac{1}{V} = \sum_k \frac{1}{2E_k - E} \quad E_F - \Delta \leq E_k \leq E_f + \Delta \quad (3.2)$$

L'equazione (3.2) è l'equazione della coppia, di fondamentale importanza. Possiamo risolverla per via grafica (Figura 3.2)

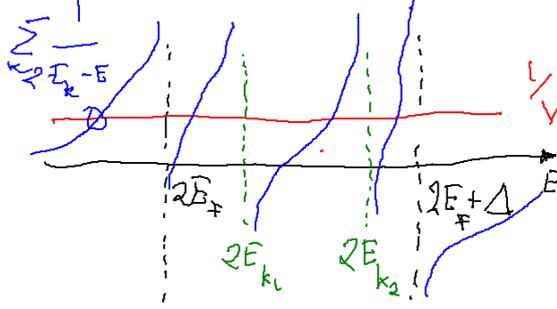


Figura 3.2: Grafico dell'equazione (3.2), ammette n soluzioni per $E > 2E_F$ (stati eccitati slegati) e una per $E < 2E_F$ (stato legato). Quest'ultima è pertanto lo stato fondamentale del sistema.

Studiamo la regione $E > 2E_f$: non può essere fatta l'approssimazione della somma in un continuo perché ci sono dei termini che divergono. Tuttavia proprio per questo motivo in tutta la sommatoria ci sono solo due termini dominanti, gli E_k più vicini ad E :

$$\dots + \frac{1}{2E_{k_1} - E} + \frac{1}{2E_{k_2} - E} + \dots$$

Con $E_{k_1} < E$ e $E_{k_2} > E$ quindi un termine diverge negativamente e uno positivamente. Quindi abbiamo soluzioni in mezzo ad ogni intervallo E_{k_1} e E_{k_2} .

Dalla soluzione grafica si evince che esiste uno stato legato di energia inferiore a $2E_f$. Questo stato legato esiste quantunque piccolo sia V ! questo è incredibile, anche per attrazioni piccolissime assicurano l'esistenza di uno stato legato. È importante che ci sia uno stato iniziale $2E_f$ minimo sotto il quale non ci sono termini della somma, altrimenti non avremmo stato legato. L'esistenza di uno stato legato non è assicurata sempre, se la forza dell'attrazione è troppo bassa lo stato legato non c'è. Mettiamoci nel limite che ci interessa, quando $E < 2E_f$, in questo caso possiamo fare l'approssimazione del continuo, perché ci interessa solo il primo ramo della soluzione:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} &= \int_{E_f}^{E_f + \Delta} \frac{1}{2} \frac{D(E') dE'}{2E' - E} \approx \frac{1}{4} D(E_f) \int_{E_f}^{E_f + \Delta} \frac{d(2E')}{2E' - E} \\ \frac{1}{V} &\approx \frac{1}{4} D(E_f) \ln \left(\frac{2E_f - E + 2\Delta}{2E_f - E} \right) = \frac{1}{4} D(E_f) \ln \frac{E_b + 2\Delta}{E_b} \end{aligned}$$

Con $E_b = 2E_f - E$ energia di legame:

Risolvendo su E_b otteniamo:

$$E_b = \frac{2\Delta}{e^{4/V D(E_f)} - 1} \approx 2\Delta e^{-4/V D(E_f)}$$

Questa soluzione chiarisce il motivo per cui gli approcci perturbativi per tentare di giungere alla coppia di Cooper hanno fallito: la funzione E_b non è analitica per piccoli V . Vediamo numericamente che succede all'energia di legame. Il Δ è legato alla frequenza di Debaye, tuttavia l'esponenziale che moltiplica è in grado di ammazzare questo valore anche di un fattore 100 – 1000, pertanto la temperatura critica è molto inferiore all'energia dei fononi, e questo spiega il puzzle delle temperature bassissime.

Esiste sempre uno stato legato, purché esista la sfera di fermi e un potenziale attrattivo, piccolo a piacere.

Questo è un modello giocattolo, in cui abbiamo aggiunto ad hoc due elettroni nel sistema. Due elettroni qualunque già presente nel sistema non è immediato capire che è quello che si verifica.

3.1 Quanto è grande la coppia di Cooper?

Ragioniamo per ordini di grandezza.

$$\Delta \approx \hbar\omega_D \sim \delta \left(\frac{p^2}{2m} \right) = 2\delta p \frac{p_f}{2m}$$

$$\delta p \approx \frac{m(\hbar\omega_d)}{p_f}$$

L'estensione spaziale per principio di indeterminazione è data da:

$$\xi = \delta x = \frac{\hbar}{\delta p} = \frac{\hbar p_f}{m(\hbar\omega_d)} \approx \frac{\hbar^2 k_f}{m(\hbar\omega_d)} \approx \frac{1}{k_f} \frac{E_f}{\hbar\omega_d} \approx 10^2 \text{ nm}$$

Questo spiega perché le coppie di cooper esistono, questi elettroni sono lontanissimi tra loro, quindi la repulsione Coulombiana viene sconfitta, mentre l'attrazione fononica è estremamente forte.

L'attrazione Coulombiana perde questo braccio di ferro. Questo numero così grande ha anche altri effetti. Dobbiamo costruire lo stato termodinamico fatto da tante altre coppie. In un concetto di transizione di fase le coppie interagiscono con tantissime altre coppie, e questo va verso una direzione che va verso la teoria di campo medio, in cui tutti interagiscono con tutti indipendentemente dalla loro posizione.

3.2 Seconda quantizzazione per fermioni

L'equazione di Schroedinger standard in prima quantizzazione è

$$H\varphi_j(x) = E_j\varphi_j(x)$$

Gli operatori di campo creano e distruggono una particella in x :

$$\Psi(x) = \sum_j c_j \varphi_j(x) \quad \Psi^\dagger(x) = \sum_j c_j^* \varphi_j^*(x)$$

Lo stato di vuoto è descritto da:

$$\Phi_{vacuum} = |0, 0, 0, \dots, 0\rangle = |0\rangle$$

Lo stato ground state per n elettroni è:

$$\Phi_0 = |1_1, 1_2, 1_3, \dots, 1_N, 0_{N+1}, \dots\rangle \quad (3.3)$$

Vogliamo definire un operatore che dato il Ground state crea una particella nella posizione $x - x'$.

Definiamo l'operatore densità:

$$\begin{aligned} \rho(x) &= \int dx' \Psi^\dagger(x) \delta(x - x') \Psi(x') \\ \rho(x) \Psi^\dagger(x') |0\rangle &= \int dx' \Psi^\dagger(x) \delta(x - x'') \underbrace{\Psi(x'') \Psi^\dagger(x') |0\rangle}_{\delta(x'' - x') |0\rangle} \\ \rho(x) \Psi^\dagger(x') |0\rangle &= \delta(x - x') \Psi^\dagger(x) |0\rangle \\ \Psi(a) |0\rangle &= |a\rangle \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\Psi(b) \Psi(a) |0\rangle = \Psi(b) |a\rangle = |a, b\rangle \quad (3.5)$$

Poiché

$$\Psi(a) \Psi(b) + \Psi(b) \Psi(a) = 0 \quad |a, b\rangle = -|b, a\rangle$$

Quindi la regola di anticommutazione tra gli operatori di campo è diretta conseguenza dell'inversione di segno per scambio.

$$\{c_l, c_m^\dagger\} = c_l c_m^\dagger + c_m^\dagger c_l = \delta_{lm} \quad (3.6)$$

$$\{c_l, c_m\} = \{c_l^\dagger, c_m^\dagger\} = 0 \quad (3.7)$$

Uno stato eccitato è

$$\Phi = c_k^\dagger |0\rangle = c_k^\dagger |0_1, 0_2, \dots, 0_k, \dots, 0\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 1_k, \dots, 0\rangle$$

Da cui lo stato fondamentale è

$$\Phi_0 = \left(\prod_{|k| < k_f} c_k^\dagger \right) |0\rangle$$

Vediamo ora il problema del segno. Consideriamo uno stato con due particelle

$$|\Phi\rangle = c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle$$

Applichiamo l'operatore C_2 :

$$c_2 |\Phi\rangle = c_2 c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle$$

Grazie alle regole di anticommutazione abbiamo:

$$c_2 c_1^\dagger = -c_1^\dagger c_2$$

$$c_2 c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle = -c_1^\dagger c_2 c_2^\dagger |0\rangle = -c_1^\dagger (1 - c_2^\dagger c_2) |0\rangle$$

Ora il termine $c_2^\dagger c_2$ è l'operatore conteggio, sullo stato di vuoto vale zero. Da cui otteniamo:

$$c_2 c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle = -c_1^\dagger |0\rangle$$

Se adesso operiamo con c_1 invece otteniamo:

$$c_1 |\Phi\rangle = c_1 c_1^\dagger c_2^\dagger |0\rangle = c_2^\dagger |0\rangle$$

In questo caso non abbiamo dovuto fare scambi, quindi non abbiamo nessun segno negativo. Avendo n elettroni se operiamo con c_n dobbiamo fare $n - 1$ scambi. Abbiamo

$$\begin{aligned} c_j |\dots n_j \dots\rangle &= n_j \theta^j |\dots 0_j \dots\rangle \\ c_j^\dagger |\dots n_j \dots\rangle &= (1 - n_j) \theta^j |\dots 1_j \dots\rangle \\ \theta^j &= (-1)^{p_j} \quad p_j = \text{numero di stati a sinistra di } j \end{aligned}$$

Gli operatori che creano e distruggono particelle nello spazio reale godono della regola di commutazione

$$\{\Psi(x), \Psi^\dagger(x')\} = \delta(x - x') \quad (3.8)$$

Questa è facile da dimostrare:

$$\{\Psi(x), \Psi^\dagger(x')\} = \sum_{jl} \{c_j, c_l^\dagger\} \varphi_j(x) \varphi_l^*(x') = \sum_j \varphi_j(x) \varphi_j^*(x') = \delta(x - x')$$

Definiamo l'operatore densità ad una particella:

$$\rho(x) = \int dx' \Psi^\dagger(x') \delta(x - x') \Psi(x') = \Psi^\dagger(x) \Psi(x) = \sum_{ij} c_i^\dagger c_j \varphi_i^*(x) \varphi_j(x)$$

L'operatore densità è molto utile anche per scrivere qualunque Hamiltoniana in seconda quantizzazione, che può essere ottenuta direttamente dagli analoghi classici.

L'Hamiltoniana della particella libera ad esempio si scrive in questo modo:

$$H = \int dx \psi^\dagger(x) \frac{p^2}{2m} \psi(x) = \int dx \sum_{jl} c_j^\dagger c_l \varphi_j^*(x) \frac{p^2}{2m} \varphi_l(x)$$

Sostituiamo

$$\begin{aligned} p &\rightarrow -i\hbar\nabla \\ H &= \sum_j \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m} c_j^\dagger c_j \end{aligned}$$

La sua interpretazione fisica è immediata se applichiamo questa Hamiltoniana ad uno stato: per ogni stato j di singola particella sommiamo la sua energia cinetica $\hbar^2 k_j^2 / 2m$ per il numero di elettroni in quello stato. In questo caso φ è un'onda piana, in generale questo può essere generalizzato all'autofunzione della Hamiltoniana di singola particella. Se abbiamo un sistema interagente più incasinato conviene che le ϕ siano delle funzioni locali modulate da onde piane. Queste prendono il nome di *funzioni di Vannier*.

Ora dobbiamo scrivere il caso interagente. Consideriamo l'interazione Coulombiana. Per brevità di scrittura introduciamo la convenzione che l'apice sulla sommatoria voglia dire di considerare gli indici sempre diversi tra loro:

$$\sum'_{i,j} = \sum'_{\substack{i,j \\ i \neq j}}$$

$$H = \frac{1}{2m} \sum_j p_j^2 + \frac{1}{2} \sum'_{ij} \frac{e^2}{|x_i - x_j|} + V(x)$$

Facciamo la trasformata di Fourier del termine coulombiano.

$$H = \frac{1}{2m} \sum_j p_j^2 + \frac{1}{2} \sum'_{ij} \frac{4\pi e^2}{q^2} e^{iq(x_i - x_j)}$$

Introduciamo l'operatore densità:

$$\rho(x) = \sum_q \rho(q) e^{iqx} = \sum_i \delta(x - x_i)$$

Adesso possiamo usare l'operatore densità per riscrivere l'esponenziale:

$$\begin{aligned} \sum'_{i,j} e^{iq(x_i - x_j)} &= \sum'_{i,j} \int dx_1 dx_2 \delta(x - x_1) \delta(x - x_2) e^{iq(x_1 - x_2)} = \\ &= \int dx_1 dx_2 \rho(x_1) \rho(x_2) e^{iq(x_1 - x_2)} = \\ &= \int dx_1 \rho(x_1) e^{iqx_1} \int dx_2 \rho(x_2) e^{-iqx_2} = \\ &= \rho_q^\dagger \rho_q \end{aligned}$$

Sostituiamo all'interno dell'Hamiltoniana, introducendo un termine n di *Jellium* chiarito in seguito:

$$H = \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 + \sum_{q \neq 0} \frac{2\pi e^2}{q^2} (\rho_q^\dagger \rho_q - n)$$

Ricordiamo la definizione dell'operatore densità ricavata in equazione (2.35).

$$\rho_q = \sum_k c_k^\dagger c_{k+q} \quad \rho_q^\dagger = \sum_k c_{k+q}^\dagger c_k = \rho_{-q}$$

Il termine $-n$ nella Hamiltoniana è il background positivo del reticolo ionico, le sue eccitazioni corrispondono alle modulazione della densità di carica. Siccome non vogliamo preoccuparci degli ioni introduciamo il *Jellium*: un substrato di carica positiva che elimina l'infinito della self-energia.

L'energia Coulombiana si ottiene:

$$\sum_q \frac{2\pi e^2}{q^2} (\rho_q^\dagger \rho_q - n) = \sum_q \left(\sum_{kk'} \frac{2\pi e^2}{q^2} c_k^\dagger c_{k+q} c_{k'+q}^\dagger c_{k'} - n \right) \quad (3.9)$$

Ora possiamo passare a descrivere in seconda quantizzazione le interazioni della coppia di Cooper.

3.3 Interazioni nella coppia di Cooper

Il sistema ha tutti gli stati occupati fino a k_f . Aggiungiamo un fermione con energia $\varepsilon > \mu$ creando uno stato eccitato. Potremo aggiungere una buca con energia $\varepsilon < \mu$.

Per $\varepsilon_k < \mu$

$$\begin{aligned} c_{k\sigma}^\dagger \Phi_0 &= 0 & \varepsilon_k < \mu \\ c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \Phi_0 &= \Phi_0 & \varepsilon_k < \mu \\ c_{k\sigma} \Phi_0 &= 0 & \varepsilon_k > \mu \\ c_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger \Phi_0 &= \Phi_0 & \varepsilon_k > \mu \end{aligned}$$

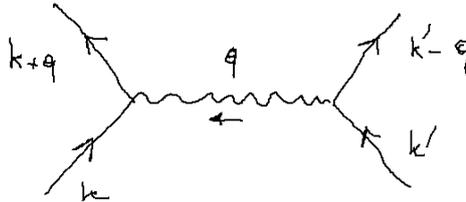
L'hamiltoniana di singola particella è

$$H_0 = \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma}$$

Vediamo i termini di interazione. Consideriamo due termini fuori dalla sfera di Fermi

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{k\sigma, k'\sigma', q}^{\substack{\varepsilon_k > \mu \\ \varepsilon'_k > \mu}} c_{k+q, \sigma}^\dagger c_{k'-q, \sigma}^\dagger w_{kk'} c_{k'\sigma'} c_{k\sigma}$$

Ossia abbiamo un termine che va da k a $k+q$ e k' in $k'-q$ e il potenziale trasporta q :



Adesso abbiamo anche il termine:

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{k\sigma, k'\sigma', q}^{\substack{\varepsilon_k > \mu \\ \varepsilon'_k < \mu}} c_{k+q, \sigma}^\dagger c_{k'-q, \sigma} w_{kk'} c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k\sigma}$$

In questo caso eccitiamo un elettrone a partire dalla sfera di Fermi L'ultimo termine è tutto interno alla sfera di Fermi, quindi abbiamo l'interazione tra due buche.

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{k\sigma, k'\sigma', q}^{\substack{\varepsilon_k < \mu \\ \varepsilon'_k < \mu}} c_{k+q, \sigma} c_{k'-q, \sigma} w_{kk'} c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k\sigma}^\dagger$$

Per ora è importante solo il primo termine. Aggiungiamo i due elettroni. La coppia di Cooper consiste in due elettroni extra. Per lo stato non interagente abbiamo

$$H_0 |\Phi_0\rangle = E_0 |\Phi_0\rangle$$

$$E_0 = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle = \sum_{k\sigma}^{\varepsilon < \mu} (\varepsilon_k - \mu)$$

Ora consideriamo l'energia aggiuntiva:

$$\hat{H} = H_0 - E_0 \quad \hat{H} |\Phi_0\rangle = 0 |\Phi_0\rangle$$

Aggiungiamo una particella sopra a μ

$$\varepsilon_{k_1} > \mu \quad |k_1 \sigma_1\rangle = c_{k_1 \sigma_1}^\dagger |\Phi_0\rangle$$

$$\hat{H} |k_1, \sigma_1\rangle = |k_1, \sigma_1\rangle (\varepsilon_{k_1} - \mu)$$

Questo perché

$$\hat{H} |k_1 \sigma_1\rangle = \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma} c_{k_1 \sigma_1}^\dagger |\Phi_0\rangle = \sum_{k\sigma} c_{k_1 \sigma_1} (\varepsilon_k - \mu) |\Phi_0\rangle \delta_{k\sigma, k_1 \sigma_1}$$

Analogamente per la buca

$$|k_1 \sigma_1\rangle = c_{k_1 \sigma_1} |\Phi_0\rangle \quad H |k_1 \sigma_1\rangle = |k_1 \sigma_1\rangle |\varepsilon_{k_1} - \mu| \quad \varepsilon_{k_1} < \mu$$

Da cui abbiamo

$$\eta_k = |\varepsilon_k - \mu|$$

Prendiamo due particelle.

$$|k_1 \sigma_1, k_2 \sigma_2\rangle = c_{k_1 \sigma_1}^\dagger c_{k_2 \sigma_2}^\dagger |\Phi_0\rangle$$

Calcoliamo l'hamiltoniana non interagente.

$$\sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma} c_{k_1 \sigma_1}^\dagger c_{k_2 \sigma_2}^\dagger |\Phi_0\rangle$$

Qui viene qualcosa di non nulla solo quando la somma ha $k_1 \sigma_1$ o $k_2 \sigma_2$:

$$c_{k_1 \sigma_1}^\dagger (\varepsilon_{k_1} - \mu) c_{k_1 \sigma_1} c_{k_1 \sigma_1}^\dagger c_{k_2 \sigma_2}^\dagger |\Phi_0\rangle + c_{k_2 \sigma_2}^\dagger (\varepsilon_{k_2} - \mu) c_{k_2 \sigma_2} c_{k_1 \sigma_1}^\dagger c_{k_2 \sigma_2}^\dagger |\Phi_0\rangle$$

Prendiamo nel primo termine l'operatore di k_2 e spostiamolo a sinistra di due termini. Quindi otteniamo un segno meno due volte. L'altro termine spostiamo indietro due volte il termine in k_1

$$c_{k_1 \sigma_1}^\dagger c_{k_2 \sigma_2}^\dagger (\varepsilon_{k_1} - \mu) |\Phi_0\rangle + c_{k_1 \sigma_1}^\dagger c_{k_2 \sigma_2}^\dagger (\varepsilon_{k_2} - \mu) |\Phi_0\rangle$$

L'hamiltoniana di singola particella data allo stato di Cooper da

$$\hat{H} |k_1 \sigma_1, k_2 \sigma_2\rangle = (\varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2} - 2\mu) |k_1 \sigma_1, k_2 \sigma_2\rangle = (\eta_1 + \eta_2) |k_1 \sigma_1, k_2 \sigma_2\rangle$$

Proseguiamo lo sviluppo formale della coppia di Cooper in seconda quantizzazione.

Il termine di singola particella dell'hamiltoniana effettiva in seconda quantizzazione è:

$$H_0 = \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma} |\Phi_0\rangle$$

Quando applichiamo l'hamiltoniana effettiva a una coppia di particelle otteniamo semplicemente la somma delle energie.

$$H_0 c_{k_1\sigma_1}^\dagger c_{k_2\sigma_2}^\dagger |\Phi_0\rangle = (\eta_{k_1} + \eta_{k_2}) c_{k_1\sigma_1}^\dagger c_{k_2\sigma_2}^\dagger |\Phi_0\rangle$$

Termine di interazione

Identifichiamo il termine di interazione: Questo termine opera solo all'esterno della sfera di Fermi. In realtà, per come lo definiamo, opera solo in una shell attorno all'energia di Fermi.

$$H_I = \frac{1}{2} \sum_{k\sigma, k'\sigma'}^{\varepsilon_k > \mu, \varepsilon_{k'} > \mu} c_{k+q, \sigma}^\dagger c_{k'-q, \sigma}^\dagger w_{k, k'+q} c_{k\sigma} c_{k'\sigma'}$$

Ed è rappresentato dal diagramma in Figura 3.3.

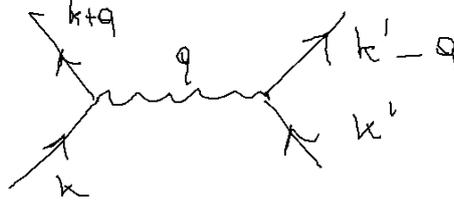


Figura 3.3: Diagramma del termine di interazione di Cooper.

Se lo applichiamo ad uno stato a due particelle otteniamo:

$$H_I c_{k\sigma}^\dagger (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma} |\Phi_0\rangle$$

Abbiamo due possibilità

$$k\sigma = k_1\sigma_1 \quad k'\sigma' = k_2\sigma_2$$

$$k\sigma = k_2\sigma_2 \quad k'\sigma' = k_1\sigma_1$$

Vediamo il primo caso

$$\frac{1}{2} c_{k_1+q}^\dagger c_{k_2-q, \sigma_2}^\dagger w_{k_1, k_2+q} c_{k_2\sigma_2} c_{k_1\sigma_1} c_{k_1\sigma_1}^\dagger c_{k_2\sigma_2}^\dagger |\Phi_0\rangle$$

Scambiando gli operatori e sfruttando che:

$$c_{k_1\sigma_1} c_{k_1\sigma_1}^\dagger |\Phi_0\rangle = |\Phi_0\rangle$$

Si ottiene:

$$\frac{1}{2}c_{k_1+q,\sigma_1}^\dagger c_{k_2-q,\sigma_2}^\dagger w_{k_1,k_2+q} |\Phi_0\rangle$$

Il secondo termine invece da:

$$\frac{1}{2}c_{k_2+q,\sigma_2}^\dagger c_{k_1-q,\sigma_1}^\dagger w_{k_2,k_1+q} c_{k_1\sigma_1} c_{k_2\sigma_2} c_{k_1\sigma_1}^\dagger c_{k_2\sigma_2}^\dagger |\Phi_0\rangle$$

Che diventa:

$$-\frac{1}{2}c_{k_2+q,\sigma_2}^\dagger c_{k_1-q,\sigma_1}^\dagger w_{k_2,k_1+q} |\Phi_0\rangle \quad (3.10)$$

Facciamo un altro scambio e sfruttiamo che w sia simmetrico rispetto a scambi per q

$$\frac{1}{2}c_{k_1-q,\sigma_1}^\dagger c_{k_2+q,\sigma_2}^\dagger w_{k_2,k_1+q} |\Phi_0\rangle = \frac{1}{2}c_{k_1+q,\sigma_1}^\dagger c_{k_2-q,\sigma_2}^\dagger \underbrace{w_{k_2,k_1-q}}_{w_{k_1,k_2+q}} |\Phi_0\rangle \quad (3.11)$$

Ma questo è uguale al primo caso. Possiamo scrivere.

Da questo possiamo scrivere l'hamiltoniana di interazione effettiva:

$$\hat{H}c_{k_1\sigma_1}^\dagger c_{k_2\sigma_2}^\dagger |\Phi_0\rangle = c_{k_1\sigma_1}^\dagger c_{k_2\sigma_2}^\dagger (\eta_{k_1} + \eta_{k_2}) |\Phi_0\rangle + \sum_q c_{k_1+q,\sigma_1}^\dagger c_{k_2-q,\sigma_2}^\dagger w_{k_1,k_2+q} |\Phi_0\rangle \quad (3.12)$$

Questa è l'hamiltoniana efficace per cooper in seconda quantizzazione.

3.3.1 Soluzione della coppia di Cooper in seconda quantizzazione

Prendiamo il caso $K_{tot} = 0$, ossia a centro di massa fermo:

$$k_2 = -k_1$$

Facciamo una sovrapposizione di funzioni d'onda del tipo:

$$|\Psi\rangle = \sum_k a_k |k\sigma, -k\sigma'\rangle = \sum_k a_k c_{k\sigma}^\dagger c_{-k,\sigma'}^\dagger |\Phi_0\rangle$$

Questa funzione d'onda deve risolvere l'hamiltoniana efficace:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

Applichiamo l'hamiltoniana alla funzione d'onda:

$$H|\Psi\rangle = \sum_k c_{k\sigma}^\dagger c_{-k\sigma'}^\dagger |\Phi_0\rangle 2\eta_k a_k + \sum_{kq} c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{-k-q,\sigma'}^\dagger |\Phi_0\rangle w_{k,-k,q} a_k$$

Moltiplichiamo tutto per lo stato fondamentale:

$$\langle\Phi_0|c_{-k'\sigma'}c_{k'\sigma}\hat{H}|\Psi\rangle$$

Iniziamo a calcolare alcuni termini:

$$\langle\Phi_0|c_{-k'\sigma'}c_{k'\sigma}c_{k\sigma}^\dagger c_{-k\sigma'}^\dagger|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_0|c_{-k'\sigma'}(\delta_{kk'} - c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma})c_{-k\sigma'}^\dagger|\Phi_0\rangle =$$

$$= \langle \Phi_0 | \underbrace{c_{-k'\sigma'} c_{-k\sigma'}^\dagger}_{\delta_{kk'} - c_{-k\sigma'}^\dagger c_{-k'\sigma'}} | \Phi_0 \rangle \delta_{kk'} - \langle \Phi_0 | c_{-k'\sigma'} c_{k\sigma}^\dagger \underbrace{c_{k'\sigma} c_{-k\sigma'}^\dagger}_{\delta_{-kk'} \delta_{\sigma\sigma'} - c_{-k\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma}} | \Phi_0 \rangle$$

Da cui otteniamo

$$\delta_{kk'} - \langle \Phi_0 | (\delta_{-kk'} \delta_{\sigma\sigma'} - c_{k\sigma}^\dagger c_{-k'\sigma'}) \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'} | \Phi_0 \rangle$$

Da cui otteniamo:

$$\delta_{kk'} - \delta_{-kk'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

Otteniamo che

$$E(a'_k - a'_k \delta_{\sigma\sigma'}) = 2\eta_{k'} (a_{k'} - a_{-k} \delta_{\sigma\sigma'}) + \sum_q w_{k'-q, -k'+q, q} (a_{k'-q} - a_{-k'+q} \delta_{\sigma\sigma'})$$

Abbiamo usato

$$w_{k'-q, k'+q, q} = w_{k'+q, -k'-q, -q}$$

Dobbiamo decidere che stato andiamo a cercare. Consideriamo lo stato a singoletto

$$\sigma' = -\sigma \quad \text{Singoletto}$$

$$\sigma' = \sigma \quad \text{Tripletto}$$

Possiamo scriverci termini nello spazio:

$$a_{\vec{k}} = a_k Y_{lm} \left(\begin{array}{c} \vec{k} \\ |\vec{k}| \end{array} \right)$$

A questo punto a seconda della simmetria che sto cercando nelle funzioni d'onda scelgo le opportune armoniche sferiche.

Coppie di Cooper con il principio variazionale

Rinominiamo gli indici per semplicità:

$$k' \rightarrow k \quad k' - q \rightarrow k'$$

Considerando che

$$w_{k', -k', k-k'} = \lambda_l w_k^l$$

Riotteniamo l'equazione di Cooper:

$$a_k = \frac{\lambda_l w_k^l C}{E_{lm} - 2\eta_k} \quad C = \sum_{k'} w_k^l a_{k'}$$

$$1 = \lambda_l \sum_k |w_k^l|^2 \frac{1}{E_l - 2\eta_k} = \lambda_l F(E_{lm})$$

Abbiamo generalizzato nel caso di simmetria pari nel w_k^l ma non costanti.

Una funzione d'onda generale che ha queste proprietà può essere

$$\sum_{kk'\sigma\sigma'} \alpha_{\sigma\sigma'}(k, k') c_{k\sigma}^\dagger c_{k'\sigma'} | \Phi_0 \rangle$$

Assumiamo come funzione d'onda:

$$|\Psi\rangle = \sum_k \alpha(k) c_{-k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}^\dagger |\Phi_0\rangle$$

Qual è l'energia aspettata di questo stato?

$$E = 2 \sum_{\varepsilon > \varepsilon_F} |\alpha(k)|^2 - \frac{1}{2} \sum_{kq} (\omega_{k,-k,q} + w_{-k,k,-q}) \alpha^*(k-q) \alpha(k)$$

Per trovare l'energia della funzione d'onda totale basta minimizzare con i moltiplicatori di Lagrange rispetto alle variazioni di α^* :

$$E - \lambda \sum_k (|\alpha(k)|^2 - 1)$$

Questa trattazione può essere ricavata direttamente da quanto fatto precedentemente; prendiamo lo stato $|\alpha\rangle$ definito nel seguente modo:

$$|\alpha\rangle = \sum_k \alpha(k) c_{k,\sigma}^\dagger c_{-k,\sigma'}^\dagger |\Phi_0\rangle$$

Con $|\Phi_0\rangle$ il mare di Fermi. Calcoliamo l'elemento di matrice:

$$E(\alpha) = \langle \alpha | H | \alpha \rangle = \langle \alpha | H_0 + H_I | \alpha \rangle$$

Dove H_0 è la parte di Hamiltoniana di singola particella, mentre H_I è l'interazione della coppia di Cooper.

Il termine con H_0 può essere calcolato facilmente, ricordando che l'applicazione di H_0 allo stato α si ottiene facilmente dall'equazione (3.12).

$$\langle \alpha | H_0 | \alpha \rangle = \sum_{k_1 k_2} 2\varepsilon_{k_2} \alpha(k_2) \alpha^*(k_1) \langle \Phi_0 | c_{-k_1,\sigma'} c_{k_1,\sigma} c_{k_2,\sigma}^\dagger c_{k_2,\sigma'}^\dagger | \Phi_0 \rangle$$

Il termine dentro il valore atteso l'abbiamo già calcolato, ed è pari a:

$$\langle \Phi_0 | c_{-k_1,\sigma'} c_{k_1,\sigma} c_{k_2,\sigma}^\dagger c_{-k_2,\sigma'}^\dagger | \Phi_0 \rangle = \delta_{k_1,k_2} - \delta_{k_2,-k_1} \delta_{\sigma\sigma'}$$

Il secondo termine deve essere preso in considerazione quando si studia l'interazione di tripletto, per cui si può avere $\sigma = \sigma'$.

$$\langle \alpha | H_0 | \alpha \rangle = \sum_k 2\varepsilon_k |\alpha(k)|^2 - \delta_{\sigma,\sigma'} \sum_k 2\varepsilon_k \alpha(k) \alpha^*(-k)$$

Allo stesso modo si può prendere il termine di Cooper:

$$\langle \alpha | H_I | \alpha \rangle = \sum_{k_1 k_2 q} w_{k_2,-k_2,q} \alpha(k_2) \alpha^*(k_1) \langle \Phi_0 | c_{-k_1,\sigma'} c_{k_1,\sigma} c_{k_2+q,\sigma}^\dagger c_{-k_2-q,\sigma'}^\dagger | \Phi_0 \rangle$$

$$\langle \alpha | H_I | \alpha \rangle = \sum_{kq} w_{k,-k,q} \alpha(k) \alpha^*(k+q) - \delta_{\sigma,\sigma'} \sum_{kq} w_{k,-k,q} \alpha(k) \alpha^*(-k-q)$$

Studiamo ora cosa succede per funzioni coppie di singoletto, in cui $\sigma \neq \sigma'$. Nella sommatoria di H_I spostiamo tutti i $k \rightarrow k+q$, in modo da avere lo stesso argomento di α^*

$$\langle \alpha | E | \alpha \rangle = \sum_k 2\varepsilon_k \alpha(k) \alpha^*(k) + \sum_{kq} w_{k+q,-k-q,q} \alpha(k+q) \alpha^*(k)$$

A questo punto imponiamo il vincolo sulla normalizzazione di $|\alpha\rangle$ e usiamo i moltiplicatori di Lagrange.

$$\mathcal{L}(\alpha, \alpha^*) = \langle \alpha | E | \alpha \rangle - \lambda \langle \alpha | \alpha \rangle$$

$$\mathcal{L}(\alpha, \alpha^*) = \sum_k 2\varepsilon_k \alpha(k) \alpha^*(k) + \sum_{kq} w_{k+q, -k-q, q} \alpha(k+q) \alpha^*(k) - \lambda \sum_k \alpha(k) \alpha^*(k)$$

Supponiamo α e α^* come due parametri indipendenti, è infatti banale dimostrare che il minimo di $\mathcal{L}(\alpha, \alpha^*)$ si ha quando α è il complesso coniugato di α^* .

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \alpha^*(k')} = 0$$

$$(2\varepsilon_{k'} - \lambda) a(k') = - \sum_q w_{k'+q, -k'-q, q} \alpha(k' + q)$$

Sia $\vec{k} = \vec{k}' + \vec{q}$, otteniamo:

$$(2\varepsilon_{k'} - \lambda) a(k') = - \sum_{|\vec{k}| > k_f} V(k', k) \alpha(k)$$

Se sostituiamo il potenziale attrattivo costante, come fatto in prima quantizzazione:

$$V(k, k') = -V$$

Si riottiene esattamente l'equazione di Cooper in prima quantizzazione.

Dal confronto con il caso di prima quantizzazione si evince anche il ruolo di λ . Infatti λ è qui una costante arbitraria, che deve essere fissata dalla normalizzazione delle α , mentre nel caso in prima quantizzazione, dove avevamo già normalizzato lo stato, al posto di λ appariva l'energia del sistema.

In questo caso quindi λ rappresenta l'energia della coppia di Cooper.

La trattazione in seconda quantizzazione è più completa rispetto a quella in prima, perché può essere facilmente estesa anche al caso di tripletto.

3.3.2 Eccitazione di tripletto

Quando scriviamo che la funzione è la somma di coppie, se abbiamo l'eccitazione di singoletto vuol dire che la funzione d'onda nello spazio è simmetrica $a_k = a_{-k}$ e devo avere termini simmetrici dell'interazione.

Da dove possono venire termini dell'interazione non simmetrici?

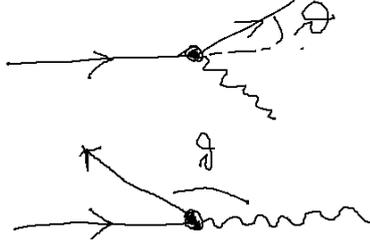
L'interazione dall'accoppiamento elettrone fonone viene un $g(\vec{k}, \vec{q})$. L'approssimazione della coppia di Cooper è

$$g(\vec{k}, \vec{q}) = g_0$$

Se facciamo

$$\sum_k a(\vec{k}) g(\vec{k}, \vec{q})$$

Se $g \sim |\vec{k}|$ allora non è detto che la somma faccia zero se le funzioni d'onda sono completamente antisimmetriche. Possiamo avere due tipi di scattering:



Costruiamo la funzione d'onda come

$$|\Psi\rangle = \sum_k \alpha(k) c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\uparrow}^\dagger |\Phi_0\rangle \quad \alpha(k) = -\alpha(-k) \quad (3.13)$$

L'energia diventa

$$E = 2 \sum_k \varepsilon_k |\alpha(k)|^2 - \frac{1}{2} \sum_{kq} (w_{k-q, -k+q, q} + w_{-k+q, k-q, q}) \alpha^*(k) \alpha(k-q) \quad (3.14)$$

Minimizzando con i moltiplicatori di Lagrange per preservare l'unitarietà della soluzione si ottiene:

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha^*(k)} - \frac{\partial}{\partial \alpha^*} \lambda \left[\sum_k |\alpha(k)|^2 - 1 \right] = 0$$

$$(2\varepsilon_k - \lambda) \alpha(k) = \frac{1}{2} \sum_q (w_{k-q, -k+q, q} + w_{-k+q, k-q, q}) \alpha(k-q)$$

Cambiamo gli indici della sommatoria introduciamo il potenziale $V(k, k')$:

$$(2\varepsilon_k - \lambda) \alpha(k) = \sum_{0 < \varepsilon_k < \hbar\omega_D} V(k, k') \alpha(k')$$

Un esempio di potenziale che favorisce stati di tripletto è il seguente:

$$w_{k, -k, q} = v_1 + v_2 \frac{\vec{k} \cdot (\vec{k} + \vec{q})}{k|\vec{k} + \vec{q}|} \quad (3.15)$$

Questo è uno scattering Forward (il termine di interazione è più grande per piccoli \vec{q}). Inseriamolo all'interno della sommatoria, e facciamo l'approssimazione del continuo.

$$(2\varepsilon_k - \lambda) \alpha(k) = N(0) v_2 \int d\varepsilon \int \frac{d\Omega}{4\pi} \alpha(k') \frac{\vec{k}' \cdot \vec{k}}{|\vec{k}'| |\vec{k}|}$$

Nell'ultimo passaggio siamo passati dal modulo di \vec{k} all'integrale in energia $d\varepsilon$, che si porta appresso la densità degli stati sulla superficie di Fermi $N(0)$.

Questa è l'equazione di auto-consistenza in $\alpha(k)$. Per risolverla usiamo l'*ansatz* seguente:

$$\begin{aligned}\alpha(\vec{k}) &= (\vec{k} \cdot \vec{a})\beta(\varepsilon) \\ (2\varepsilon_k - \lambda)(\vec{k} \cdot \vec{a})\beta(\varepsilon) &= \frac{1}{3}N(0)v_2(\vec{k} \cdot \vec{q}) \int_0^{\hbar\omega_D} d\varepsilon\beta(\varepsilon) \\ (2\varepsilon_k - \lambda)\beta(\varepsilon) &= \frac{1}{3}N(0)v_2 \int_0^{\hbar\omega_D} d\varepsilon\beta(\varepsilon)\end{aligned}$$

Da cui otteniamo lo stato di tripletto:

$$-\lambda = 2\hbar\omega e^{-\frac{6}{N(0)v_2}}$$

Capitolo 4

Teoria BCS

La coppia di Cooper dimostra che, se aggiungiamo due elettroni "esterni" al sistema, che interagiscono con tutti gli altri solo tramite il principio di esclusione di Pauli, questi formano uno stato legato di energia minore dell'energia di Fermi. Per descrivere però correttamente la superconduttività occorre considerare come gli elettroni all'interno del metallo interagiscono tra loro attraverso l'interazione di Cooper, e che tipo di stato si forma a causa dell'interazione simultanea di tutti gli elettroni. Questo è lo scopo della teoria BCS.

4.1 BCS Hamiltonian

Scriviamo la Hamiltoniana del sistema:

$$H_{BCS} = \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger (\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma} - \frac{g}{V} \sum_{k k'} \begin{matrix} |\varepsilon_k - \mu| < \omega_D \\ |\varepsilon_{k'} - \mu| < \omega_D \end{matrix} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \quad (4.1)$$

Per far convergere l'integrale V deve andare come

$$V \sim r^{-(n-1)}$$

Qui la teoria di campo medio è molto buoni, perché rispetto al modello di Ising gli elettroni interagiscono a alte temperatura.

4.1.1 Trasformazione Bogolubou-Valatin

La trasformazione candidata per diagonalizzare la Hamiltoniana può essere:

$$b_{k\uparrow} = u_k c_{k\uparrow} - v_k c_{-k\downarrow}^\dagger$$

$$b_{k\downarrow} = u_k c_{k\downarrow} + v_k c_{-k\uparrow}^\dagger$$

O in generale:

$$b_{k\sigma} = u_k c_{k\sigma} - \sigma v_k c_{-k, -\sigma}^\dagger$$

$$b_{k\sigma}^\dagger = u_k c_{k\sigma}^\dagger - \sigma c_{-k, -\sigma} v_k$$

Verifichiamo che la trasformazione sia canonica. Per farlo occorre verificare che i nuovi operatori trasformati rispettino le regole di anticommutazione.

$$\{b_{k\sigma}, b_{k'\sigma'}\} = \left(u_k c_{k\sigma} - \sigma v_k c_{-k-\sigma}^\dagger\right) \left(u_{k'} c_{k'\sigma'} - \sigma' v_{k'} c_{-k',-\sigma'}^\dagger\right) + \\ + \left(u_{k'} c_{k'\sigma'} - \sigma' v_{k'} c_{-k',-\sigma'}^\dagger\right) \left(u_k c_{k\sigma} - \sigma v_k c_{-k-\sigma}^\dagger\right)$$

Si raggruppano i termini in questo modo:

$$\{b_{k\sigma}, b_{k'\sigma'}\} = -u_k v_{k'} \sigma' \left(c_{k\sigma} c_{-k',-\sigma'}^\dagger + c_{-k',-\sigma'}^\dagger c_{k\sigma}\right) - u_{k'} v_k \sigma \left(c_{-k,-\sigma}^\dagger c_{k'\sigma'} + c_{k'\sigma'} c_{-k,-\sigma}^\dagger\right) + \\ + u_k u_{k'} (c_{k\sigma} c_{k'\sigma'} + c_{k'\sigma'} c_{k\sigma}) + \sigma \sigma' v_k v_{k'} \left(c_{-k,-\sigma}^\dagger c_{-k',-\sigma'}^\dagger + c_{-k',-\sigma'}^\dagger c_{-k,-\sigma}^\dagger\right)$$

Gli ultimi due termini sono nulli per via del fatto che sono anticommutatori di operatori fermionici dello stesso tipo (creazione o distruzione).

$$\{b_{k\sigma}, b_{k'\sigma'}\} = -u_k v_{k'} \sigma' \left\{c_{k\sigma}, c_{-k',-\sigma'}^\dagger\right\} - u_{k'} v_k \sigma \left\{c_{-k,-\sigma}^\dagger, c_{k'\sigma'}\right\}$$

Dai due anticommutatori rimasti otteniamo delle delta di dirac

$$\{b_{k\sigma}, b_{k'\sigma'}\} = -u_k v_{-k} (-\sigma) - u_{-k} v_k \sigma = 0$$

Quindi effettivamente la prima regola per la trasformazione canonica è rispettata. La stessa cosa può essere dimostrata per $b_{k\sigma}^\dagger, b_{k'\sigma'}^\dagger$ il cui anticommutatore fa zero. L'ultima condizione che rimane da verificare è:

$$\{b_{k\sigma}, b_{k'\sigma'}^\dagger\} = \left(u_k c_{k\sigma} - \sigma v_k c_{-k-\sigma}^\dagger\right) \left(u_{k'} c_{k'\sigma'}^\dagger - \sigma' v_{k'} c_{-k',-\sigma'}\right) + \\ + \left(u_{k'} c_{k'\sigma'}^\dagger - \sigma' v_{k'} c_{-k',-\sigma'}\right) \left(u_k c_{k\sigma} - \sigma v_k c_{-k-\sigma}^\dagger\right)$$

$$\{b_{k\sigma}, b_{k'\sigma'}^\dagger\} = u_k u_{k'} \left(c_{k\sigma} c_{k'\sigma'}^\dagger + c_{k'\sigma'}^\dagger c_{k\sigma}\right) + v_k v_{k'} \sigma \sigma' \left(c_{-k-\sigma}^\dagger c_{-k',-\sigma'} + c_{-k',-\sigma'} c_{-k-\sigma}^\dagger\right)$$

Gli altri termini si annullano direttamente e viene:

$$\{b_{k\sigma}, b_{k'\sigma'}^\dagger\} = (u_k^2 + v_k^2) \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

Da cui otteniamo la condizione di normalizzazione per gli operatori fermionici:

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad (4.2)$$

Per ricavare le trasformazioni inverse moltiplichiamo per u_k la b e per σv_k la b^\dagger :

$$u_k b_{k\sigma} = u_k^2 c_{k\sigma} - \sigma u_k v_k c_{-k-\sigma}^\dagger \\ \sigma v_k b_{-k,-\sigma}^\dagger = \sigma v_k u_k c_{-k,-\sigma}^\dagger + \sigma^2 v_k^2 c_{k\sigma}$$

Se le sommiamo si ottiene:

$$u_k b_{k\sigma} + \sigma v_k b_{-k,-\sigma}^\dagger = u_k^2 c_{k\sigma} + \sigma^2 v_k^2 c_{k\sigma} = c_{k\sigma}$$

$$\begin{cases} c_{k\sigma} = u_k b_{k\sigma} + \sigma v_k b_{-k,-\sigma}^\dagger \\ c_{k\sigma}^\dagger = u_k b_{k\sigma}^\dagger + \sigma v_k b_{-k-\sigma} \end{cases}$$

Dobbiamo mettere questa trasformazione nella Hamiltoniana. Il contatore di particelle diventa:

$$n_{k\sigma} = c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} = \left(u_k b_{k\sigma} + \sigma v_k b_{-k,-\sigma}^\dagger \right) \left(u_k b_{k\sigma}^\dagger + \sigma v_k b_{-k,-\sigma} \right)$$

$$n_{k\sigma} = u_k^2 b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} + v_k^2 b_{-k,-\sigma} b_{-k,-\sigma}^\dagger + \sigma u_k v_k \left(b_{k\sigma}^\dagger b_{-k,-\sigma}^\dagger + b_{-k,-\sigma} b_{k\sigma} \right)$$

Da cui la Hamiltoniana ad una particella diventa:

$$\begin{aligned} H_0 = & 2 \sum_k (\varepsilon_k - \mu) v_k^2 + \sum_k (\varepsilon_k - \mu) (u_k^2 - v_k^2) \sum_\sigma b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} + \\ & + 2 \sum_k (\varepsilon_k - \mu) u_k v_k \left(b_{k\uparrow}^\dagger b_{-k\downarrow}^\dagger + b_{-k\downarrow} b_{k\uparrow} - b_{k\downarrow}^\dagger b_{-k\uparrow}^\dagger - b_{-k\uparrow} b_{k\downarrow} \right) \end{aligned}$$

Introduciamo gli operatori

$$B_k = c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} = \left(u_k b_{-k\downarrow} - v_k b_{k\uparrow}^\dagger \right) \left(u_k b_{k\uparrow} + v_k b_{-k\downarrow}^\dagger \right)$$

$$B_k = u_k^2 b_{-k\downarrow} b_{k\uparrow} - v_k^2 b_{k\uparrow}^\dagger b_{-k\downarrow}^\dagger + u_k v_k \left(b_{-k\downarrow} b_{-k\downarrow}^\dagger - b_{k\uparrow}^\dagger b_{k\uparrow} \right)$$

Adesso la Hamiltoniana può essere riscritta come

$$\begin{aligned} H_{BCS} = & 2 \sum_k (\varepsilon_k - \mu) v_k^2 + \sum_k (\varepsilon_k - \mu) (u_k^2 - v_k^2) \sum_\sigma b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} + \\ & + 2 \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \mu) \sigma u_k v_k \left(b_{k,\sigma}^\dagger b_{-k,-\sigma}^\dagger + b_{-k,-\sigma} b_{k,\sigma} \right) - \frac{g}{V} \sum_{k k'} B_{k'}^\dagger B_k \\ & H_{BCS} = H_0 - \frac{g}{V} \sum_{k k'} B_{k'}^\dagger B_k \end{aligned} \quad (4.3)$$

I termini ad una sola particella si sono incasinati tantissimo, tuttavia sono semplici da trattare perché coinvolgono una sola particella. Questa trasformazione ci ha però nettamente semplificato il termine di interazione delle coppie.

Visto che gli operatori b sono fermionici¹, possiamo introdurre il numero di occupazione come fatto prima:

$$n_{k\sigma} = b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}$$

Gli operatori b^\dagger rappresentano le eccitazioni rispetto allo stato fondamentale Φ_0 .

Possiamo usare la base che diagonalizza l'operatore $n_{k\sigma}$ come incipit per applicare il principio variazionale, e trovare gli autostati e autovalori della Hamiltoniana.

L'hamilotniana contiene tutti i termini:

$$b_{k,\sigma}^\dagger b_{-k,-\sigma}^\dagger \quad b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} \quad b_{k,\sigma} b_{-k,-\sigma}$$

Tuttavia se applichiamo questi termini ad un qualunque autovettore di $n_{k\sigma}$ l'unico termine che sopravvive è quello in mezzo.

¹Le particelle create e distrutte dagli operatori b^\dagger e b soddisfano le regole di anticommutazione, pertanto sono dei fermioni.

Prendiamo quindi come base dello spazio gli autovettori di $n_{k\sigma}$. L'energia associata a ciascun vettore di base è data da:

$$E = \langle n_{k_1, \sigma_1} \cdots n_{k, \sigma} | H_{BCS} | n_{k, \sigma} \cdots n_{k_1, \sigma_1} \rangle$$

$$E = 2 \sum_k (\varepsilon_k - \mu) v_k^2 + \sum_k (\varepsilon_k - \mu) (u_k^2 - v_k^2) (n_{k\uparrow} + n_{k\downarrow}) - \frac{g}{V} \left[\sum_k u_k v_k (1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) \right]^2$$

A questo punto possiamo cercare, tra tutte le trasformazioni con u_k e v_k possibili, quella con autostati di energia stazionaria.

Per farlo usiamo la minimizzazione vincolata:

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

Questo implica che

$$\frac{\partial v_k}{\partial u_k} = -\frac{u_k}{v_k}$$

Cerchiamo la trasformazione che rende stazionaria² l'energia:

$$\frac{\partial E}{\partial u_k} = 0$$

$$\frac{\partial E}{\partial u_k} = \sum_k [-4(\varepsilon_k - \mu)u_k + 4u_k(\varepsilon_k - \mu)(n_{k\uparrow} + n_{k\downarrow})] - \frac{\partial}{\partial u_k} \frac{g}{V} \left[\sum_k u_k v_k (1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) \right]^2$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u_k} \frac{g}{V} \left[\sum_k u_k v_k (1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) \right]^2 &= 2 \frac{g}{V} \underbrace{\left[\sum_k u_k v_k (1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) \right]}_{2\Delta \sim \langle \psi | B | \psi \rangle} \frac{\partial}{\partial u_k} \sum_k u_k v_k (1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) = \\ &= 2\Delta \sum_k \left[v_k + u_k \left(-\frac{u_k}{v_k} \right) \right] (1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) \\ &= 2\Delta \sum_k \left(\frac{v_k^2 - u_k^2}{v_k} \right) (1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial E}{\partial u_k} = 0 \quad \implies \quad \left[-4(\varepsilon_k - \mu)u_k + 2\Delta \frac{u_k^2 - v_k^2}{v_k} \right] (1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) = 0$$

Alla fine arriviamo alle due equazioni:

$$\begin{cases} 2(\varepsilon_k - \mu)u_k v_k = \Delta(u_k^2 - v_k^2) \\ u_k^2 + v_k^2 = 1 \end{cases}$$

La prima viene dalla condizione di minimizzazione dell'energia, la seconda invece viene dalla normalizzazione della trasformazione canonica.

Dalla seconda equazione otteniamo:

$$v_k^2 = 1 - u_k^2 \quad u_k^2 - v_k^2 = 2u_k^2 - 1$$

²Non ho usato il termine minima, perché questa energia comprende anche quella di tutti gli stati eccitati, in funzione di $n_{k\sigma}$, non solo dello stato fondamentale.

Eleviamo al quadrato la prima:

$$\begin{aligned}
4(\varepsilon_k - \mu)^2 u_k^2 (1 - u_k^2) &= \Delta^2 (2u_k^2 - 1)^2 \\
4(\varepsilon_k - \mu)^2 (u_k^2 - u_k^4) &= \Delta^2 (4u_k^4 + 1 - 4u_k^2) \\
-4u_k^4 [(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2] + 4u_k^2 [(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2] - \Delta^2 &= 0 \\
A &= (\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2 \\
4Au_k^4 + 4Au_k^2 - \Delta^2 &= 0
\end{aligned}$$

Che risolta vale:

$$\begin{aligned}
u_k^2 &= \frac{1}{2} \pm \frac{\varepsilon_k - \mu}{2\sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \\
2u_k v_k &= \frac{\Delta}{\sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}}
\end{aligned}$$

Sostituiamo l'espressione della Δ per ottenere la condizione di self-consistenza.

$$\begin{aligned}
2u_k v_k &= \frac{g}{V} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \sum_h u_h v_h (1 - n_{h\uparrow} - n_{h\downarrow}) \\
2u_k v_k (1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) &= \frac{g}{V} \frac{1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}}{\sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \sum_h u_h v_h (1 - n_{h\uparrow} - n_{h\downarrow}) \\
\sum_k 2u_k v_k (1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}) &= \frac{g}{V} \sum_k \frac{1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}}{\sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \sum_h u_h v_h (1 - n_{h\uparrow} - n_{h\downarrow})
\end{aligned}$$

Siccome l'indice k della prima sommatoria è muto possiamo sostituirlo con h , semplificare ambo i membri e ottenere l'equazione di self-consistenza

$$1 = \frac{g}{2V} \sum_k \frac{1 - n_{k\uparrow} - n_{k\downarrow}}{\sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \quad (4.4)$$

L'equazione (4.4) è l'analogo dell'equazione di Cooper (3.2), solo che vale per l'intero sistema elettronico. Questa assomiglia all'equazione dello stato di Cooper, ma siamo in una situazione del tutto completa. Questa equazione seleziona quali eccitazioni sono effettivamente permesse, ed identifica la Gap Δ del sistema.

La soluzione può essere ottenuta per via grafica (Figura 4.1)

Andiamo a studiare lo stato fondamentale:

$$n_{k\uparrow} = n_{k\downarrow} = 0$$

La condizione di autoconsistenza diventa:

$$1 = \frac{g}{2V} \sum_k \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}} = \frac{gN(0)}{2} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\omega \frac{1}{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}} = \frac{gN(0)}{2} \ln \frac{\sqrt{\omega_c^2 - \Delta_0^2} + \omega_c}{\sqrt{\omega_c^2 + \Delta_0^2} - \omega_c}$$

Si può espandere per piccoli valori di Δ

$$1 \approx \frac{gN(0)}{2} \ln \frac{4\omega_c^2}{\Delta_0^2} \quad \Delta_0 \ll \omega_c$$

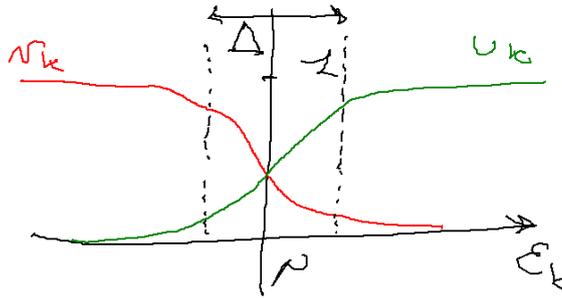


Figura 4.1: Schema della soluzione all'equazione BCS (4.4).

Dopo tutto questo conto otteniamo la seguente situazione:

$$\Delta_0 = 2\omega_c \exp\left(-\frac{1}{gN(0)}\right)$$

Questa ricorda molto la soluzione di Cooper, con la differenza che ora abbiamo la densità degli stati, grazie al fatto che l'interazione coinvolge tutti gli elettroni nella sfera di Fermi.

4.1.2 Approssimazione di campo medio

Abbiamo trovato il ground state con il principio variazionale, questo però non ci permette di scrivere la funzione d'onda dello stato fondamentale. Per risolvere questo problema bisogna diagonalizzare l'hamiltoniana. Purtroppo questo non si può fare in generale dobbiamo andare nell'ipotesi di campo medio:

$$AB = A \langle B \rangle + B \langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$$

Ossia un osservabile agisce con la media dell'altro. Da cui riscriviamo l'interazione con l'approssimazione di campo medio:

$$-\frac{g}{V} \sum_k B_k^\dagger B_k \approx -\Delta \sum_k (B_k + B_k^\dagger)$$

Dove Δ è il valore atteso di B :

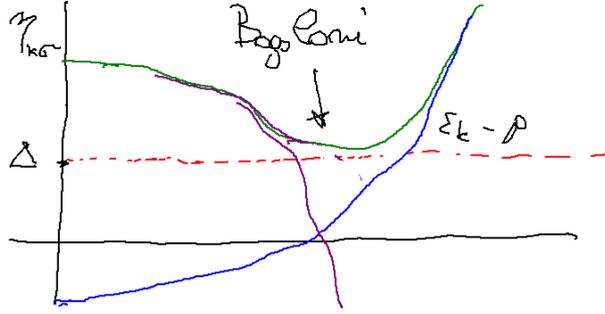
$$\Delta = \frac{g}{V} \langle \Psi_0 | \sum_k B_k | \Psi_0 \rangle$$

Stiamo trascurando i due valori attesi che corrispondono solo ad uno shift costante dell'energia (la includiamo nel potenziale chimico). L'hamiltoniana di campo medio diventa:

$$H_{MF} = 2 \sum_k (\varepsilon_k - \mu) v_k^2 + \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \mu) (u_k^2 - v_k^2) b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} - 2\Delta \sum_k u_k v_k (1 - \sum_\sigma b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma})$$

$$H_{MF} = C + \sum_{k\sigma} [(\varepsilon_k - \mu) (u_k^2 - v_k^2) - 2\Delta u_k v_k] b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} = C + \sum_{k\sigma} \eta_{k\sigma} b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}$$

$$\eta_{k\sigma} = \sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2} \quad (4.5)$$



Abbiamo diagonalizzato l'hamiltoniana rispetto agli operatori di Bogoliukov-Valachin, con una curva di dispersione data da $\eta_{k\sigma}$ (nell'approssimazione di campo medio).

I Bogoloni sono le eccitazioni descritte da b^\dagger , siccome sono dati sia da buche che da elettroni con coefficienti variabili, quindi quello che succede è che l'eccitazione non hanno carica intera.

Josefson propone di generalizzare l'eccitazione:

$$\beta_{k\sigma} = u_k c_{k\sigma} - \sigma v_k P c_{-k, -\sigma}^\dagger$$

$$\beta_{k\sigma}^\dagger = u_k c_{k\sigma}^\dagger - \sigma v_k c_{-k, -\sigma} P^\dagger$$

Gli operatori P e P^\dagger creano e annichila una coppia legata con momento zero e zero spin. Così facendo un bogolone è annichilito creando una buca normale, annichilendo con una coppia elettrone buca e creando una coppia nello stato normale.

4.2 Stato fondamentale

Abbiamo visto come le trasformazioni di Bogoliukov-Valachin permettano di calcolare l'energia dello stato fondamentale BCS in approssimazione di campo medio. Tuttavia, poiché abbiamo ricorso ad un approccio variazionale, non sappiamo ancora quale siano le funzioni d'onda dello stato fondamentale.

La Hamiltoniana di campo medio commuta completamente con l'operatore numero di eccitazioni bogoloniche; quindi condividono una base di autostati.

Scegliamo come funzione d'onda di stato fondamentale lo stato di vuoto bogolonico.

$$\langle \Psi_0 | b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} | \Psi_0 \rangle = 0$$

$$b_{k\sigma} | \Psi_0 \rangle = 0$$

Questa funzione d'onda può essere costruita nel seguente modo:

$$|\Psi\rangle_0 = \prod_k \left(u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (4.6)$$

È molto simile al tradizionale mare di Fermi dei metalli, che viene definito come:

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{k\sigma}^{\varepsilon_k < \mu} c_{k\sigma}^\dagger |0\rangle = \prod_k^{\varepsilon_k < \mu} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger |0\rangle$$

Le due funzioni coincidono se

$$\begin{cases} u_k = 0 \\ v_k = 1 \end{cases} \quad k < k_f \quad \begin{cases} u_k = 1 \\ v_k = 0 \end{cases} \quad k > k_f$$

Quindi lo stato fondamentale BCS di campo medio ha ampiezze di probabilità non nulle per eccitazioni elettroniche anche all'esterno della sfera di Fermi metallica (e corrispondenti buche all'interno).

Verifichiamo che lo stato (4.6) sia opportunamente normalizzato:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle &= \langle 0 | \left[\prod_k (u_k + v_k c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}) \right] \left[\prod_{k'} (u_{k'} + v_{k'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger) \right] | 0 \rangle = \\ &= \langle 0 | \prod_k (u_k + v_k c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}) (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle = \\ &= \prod_k (u_k^2 + v_k^2) = 1 \end{aligned}$$

Mostriamo ora che l'operatore di distruzione bogolonico annichila questo stato. Per semplicità di notazione in avanti definiamo lo stato

$$|\mathbb{k}\rangle = \prod_{k'}^{k' \neq k} (u_{k'} + v_{k'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle$$

Come lo stato fondamentale svuotato in $k \uparrow$ e $-k \downarrow$.

$$\begin{aligned} b_{k\sigma} |\Psi_0\rangle &= (u_k c_{k,\sigma} - \sigma v_k c_{-k,-\sigma}^\dagger) \prod_{k'} (u_{k'} + v_{k'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle = \\ &= (u_k c_{k,\sigma} - \sigma v_k c_{-k,-\sigma}^\dagger) (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) \prod_{k'}^{k' \neq k} (u_{k'} + v_{k'} c_{k'\uparrow}^\dagger c_{-k'\downarrow}^\dagger) | 0 \rangle = \\ &= (u_k^2 c_{k\sigma} + u_k v_k c_{k\sigma} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger - \sigma v_k u_k c_{-k,-\sigma}^\dagger - \sigma v_k^2 c_{-k,-\sigma}^\dagger c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |\mathbb{k}\rangle = \\ &= (u_k v_k - v_k u_k) = 0 \end{aligned}$$

Nell'ultimo passaggio abbiamo sfruttato le regole di commutazione. I due termini rimanenti non si annullano applicando gli operatori c solo se $\sigma = \uparrow$ (da cui viene il segno negativo del secondo). L'ultimo termine con i tre operatori di creazione si annulla perché creiamo un fermione su uno stato sempre già occupato (per ogni scelta di σ , infatti $|\mathbb{k}\rangle$ contiene un fermione in $k \downarrow$).

4.2.1 Coppie nello stato fondamentale

Abbiamo visto che lo stato fondamentale corrisponde all'assenza di eccitazioni bogoloniche, e che è uno stato in cui convivono buche e eccitazioni elettroniche, ma fisicamente a cosa corrisponde? Per capire come è fatto fisicamente questo stato, calcoliamo la funzione nella base delle posizioni del sistema, in modo da avere informazioni sulla distribuzione degli elettroni.

Proiettiamo lo stato fondamentale su uno stato in cui gli elettroni sono localizzati nelle posizioni $x_1 \cdots x_n$, in modo da avere l'ampiezza di probabilità

che gli elettroni si trovino proprio in quelle posizioni. Per far questo usiamo gli operatori di campo:

$$\psi^\dagger(x) |0\rangle = \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger e^{ikx} |0\rangle$$

Che crea una fermione in posizione x .

$$\begin{aligned} \Psi_0(x_1, \dots, x_n) &= \langle 0 | \psi(x_1) \cdots \psi(x_n) \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle = \\ &= \langle 0 | \left[\prod_{i=1}^n \sum_k e^{ikx_i} (c_{k\uparrow} + c_{k\downarrow}) \right] \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle = \\ &= \langle 0 | \sum_{k_1, \dots, k_n} \left[\prod_{i=1}^n e^{ik_i x_i} (c_{k_i\uparrow} + c_{k_i\downarrow}) \right] \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle = \\ &= \langle 0 | \sum_{k_1, \dots, k_n} \left[\prod_{i=1}^n e^{ik_i x_i} (c_{k_i\uparrow} + c_{k_i\downarrow}) \right] \left[\prod_k (1 + g_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) \right] \prod_k u_k |0\rangle = \\ &= \langle 0 | \sum_{k_1 \cdots k_n} e^{i \sum_{i=1}^n k_i x_i} (c_{k_1\uparrow} + c_{k_1\downarrow}) \cdots (c_{k_n\uparrow} + c_{k_n\downarrow}) \prod_{k \in \{k_i\}} g_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger |0\rangle \prod_k u_k = \\ &= \langle 0 | \sum_{\substack{k_1 \cdots k_n \\ \sigma_1 \cdots \sigma_n}} e^{i \sum_{i=1}^n k_i x_i} c_{k_1\sigma_1} \cdots c_{k_n\sigma_n} \prod_{k \in \{k_i\}} g_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger |0\rangle \prod_k u_k \end{aligned}$$

Spieghiamo alcuni passaggi:

$$\prod_k (1 + g_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) \longrightarrow \prod_{k \in \{k_i\}} g_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger$$

Quando facciamo la produttoria a sinistra, abbiamo tanti termini. L'unico che sopravvive al *braket* è quello in cui vengono creati esattamente gli stessi elettroni della *bra*. Questo vincola tutti i k ad essere uguali ai vari k_i della sommatoria sul *bra*.

Siccome i k di questa produttoria erano tutti diversi, anche i k_i devono essere tutti diversi tra loro. Questo impone $k_i \neq k_j$.

Siccome tutti gli operatori della produttoria finale commutano tra loro, possiamo riordinarli nel modo che preferiamo. In particolare:

$$\prod_k g_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger = g_{k_n} c_{k_n\uparrow}^\dagger c_{k_n-1\downarrow}^\dagger \cdots g_{k_2} c_{k_2\uparrow}^\dagger c_{k_1\downarrow}^\dagger$$

Con $k_{n-1} = -k_n$.

Per ottenere valori non nulli dobbiamo avere invece a sinistra si deve avere

$$\sigma_i = -\sigma_{i-1} \quad \sigma_{2i} = \uparrow \quad k_i = -k_{i-1}$$

Al fine di avere questa condizione, per ogni combinazione $\{k_i\}$ e $\{\sigma_i\}$, occorre scambiare gli operatori di distruzione fino a ordinarli opportunamente. Teniamo fissi gli operatori di distruzione e sommiamo sulle permutazioni:

$$\Psi_0(x_1, \dots, x_n) = \sum_{P\{k_i, \sigma_i\}} (-1)^P g_{k_n} e^{ik_n(x_n - x_{n-1})} \delta_{\sigma_n, -\sigma_{n-1}} \cdots g_{k_2} e^{ik_2(x_2 - x_1)} \delta_{\sigma_2, -\sigma_1}$$

Una volta che gli operatori sono stati ordinati il *braket* da 1, rimangono quindi solo gli esponenziali e le g_{k_i} . Il P è la parità della permutazione, ovvero il numero di scambi che bisogna fare agli operatori $c_{k_1\sigma_1} \cdots c_{k_n\sigma_n}$ per avere lo stesso ordine degli operatori della produttoria (avvicinare i k ai $-k$).

Questa funzione d'onda è il determinante di Slater di funzioni di coppie di fermioni, in stati di singoletto. Definendo la funzione d'onda della singola coppia $\phi(\rho)$ e lo stato di singoletto χ_n :

$$\phi(\rho) = \sum_k g_k e^{ik\rho} \quad \chi_{ij} = \delta_{\sigma_i, -\sigma_j} \quad g_k = \frac{v_k}{u_k}$$

Possiamo riscrivere la funzione d'onda in modo più compatto e esplicito

$$\Psi_0(x_1, \dots, x_n) = \sum_{P(1, \dots, n)} (-1)^P \phi(x_2 - x_1) \chi_{12} \phi(x_4 - x_3) \chi_{34} \cdots \phi(x_n - x_{n-1}) \chi_{n-1, n}$$

In altre parole lo stato fondamentale BCS è una funzione d'onda in cui tutti gli elettroni del sistema formano una coppia di Cooper con un altro elettrone gemello.

Lunghezza di coerenza

Sfruttiamo il risultato appena trovato per capire quanto sono grandi le coppie di Cooper BCS. Per farlo calcoliamo la funzione d'onda della singola coppia, in approssimazione del continuo (La funzione d'onda deve essere normalizzata, inglobiamo tutti i termini di proporzionalità dentro la condizione di normalizzazione N):

$$\phi(\rho) = N \int d^3k g(k) e^{ik\rho} = N \int_0^\infty dk k^2 g_k \int_{-1}^1 d\xi e^{i\rho k \xi}$$

L'ultimo integrale è fatto su ξ , proiezione di un versore sulla direzione di ρ :

$$\phi(\rho) = N \int_0^\infty dk k^2 g_k \frac{e^{i\rho k} - e^{-i\rho k}}{i\rho k} = \frac{N}{\rho} \int_0^\infty dk k \sin(\rho k) g_k$$

Ora poiché g_k è noto dalla soluzione delle trasformazioni di Bogoliukov-Valachin, sostituiamolo con una forma approssimata in prossimità della superficie di Fermi.

$$g_k^2 = \frac{v_k^2}{u_k^2} \quad u_k^2 = \frac{1}{2} \pm \left(\frac{\varepsilon - \mu}{\Delta} \right) \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{\Delta} \right)^2}}$$

Quindi g_k è una funzione del rapporto:

$$g_k = \tilde{g} \left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{\Delta} \right) \quad \varepsilon_k \approx \varepsilon_F + \partial_k \varepsilon_k (k - k_f)$$

$$\frac{\varepsilon_k - \mu}{\Delta} \approx \frac{\hbar v_f k}{\Delta} \quad g_k = \tilde{g} \left(\frac{\hbar v_f k}{\Delta} \right)$$

$$\phi(\rho) = \frac{N}{\rho} \int_0^\infty dk k \tilde{g} \left(\frac{\hbar v_f k}{\Delta} \right) \sin(\rho k)$$

Cambiando variabile di integrazione per rendere N adimensionale.

$$x = \frac{\hbar v_f k}{\Delta}$$

$$\phi(\rho) \propto \frac{1}{\rho} \int_0^\infty dx x \tilde{g}(x) \sin\left(\frac{\Delta x \rho}{\hbar v_f}\right) \approx f\left(\frac{\rho}{\xi_0}\right)$$

Il termine che detta le dimensioni di questa funzione è il semi-periodo della funzione seno nell'integrale. Questo è legato alla distanza di correlazione ξ_0 .

$$\xi_0 = \frac{\hbar v_f}{\pi \Delta}$$

4.3 Fluttuazioni del numero di elettroni

Abbiamo visto che la funzione d'onda dello stato fondamentale è pari al determinante di Slater del prodotto delle funzioni d'onda di coppie di Cooper.

In generale può essere scritta nel seguente modo:

$$|\Psi_0\rangle = \prod_k \left(u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle$$

Dove la produttoria in k va su tutti gli stati del sistema, non solo quelli dentro la sfera di Fermi. Si può vedere facilmente che tra questi prodotti abbiamo termini con

$$\prod_k u_k |0\rangle + \left(\prod_{k \neq k_1} u_k \right) c_{k_1\uparrow}^\dagger c_{-k_1\downarrow}^\dagger |0\rangle + \dots$$

Quindi lo stato fondamentale è una sovrapposizione lineare di stati con diverso numero di elettroni. A differenza di un metallo tradizionale, descritto dal liquido di Fermi, in cui il numero di elettroni è fissato, lo stato fondamentale BCS prevede che il numero di elettroni fluttui. Questo è conseguenza del fatto che non sono più gli elettroni le eccitazioni fondamentali del sistema.

Cerchiamo quindi di calcolare quanti elettroni di ciascuno spin sono presenti nella funzione d'onda elettronica:

$$N_\uparrow = \sum_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow}$$

$$\langle N_\uparrow \rangle = \langle \Psi_0 | \sum_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} | \Psi_0 \rangle$$

$$\begin{aligned} \langle N_\uparrow \rangle &= \langle 0 | \prod_k (u_k + v_k c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}) \sum_h c_{h\uparrow}^\dagger c_{h\uparrow} \prod_l (u_l + v_l c_{l\uparrow}^\dagger c_{-l\downarrow}^\dagger) |0\rangle \\ &= \sum_k \langle 0 | (u_k + v_k c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}) c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle \\ &= \sum_k v_k^2 \end{aligned}$$

Nell'ultimo passaggio l'unico termine che sopravvive è quello in cui facciamo il prodotto con entrambi i v_k , altrimenti l'operatore $c_{k\uparrow}$ del cotatore mi distrugge lo stato a destra (e $c_{k\uparrow}^\dagger$ distrugge quello a sinistra).

Il numero di particelle con spin \downarrow è uguale, lo stato è creato generando sempre coppie di particelle di spin opposto.

$$N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$$

Calcoliamo ora la fluttuazione:

$$\Delta N^2 = \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = \langle N_{\uparrow}^2 \rangle + \langle N_{\downarrow}^2 \rangle + 2 \langle N_{\uparrow} N_{\downarrow} \rangle - \langle N_{\uparrow} \rangle^2 - \langle N_{\downarrow} \rangle^2 - 2 \langle N_{\uparrow} \rangle \langle N_{\downarrow} \rangle$$

Sfruttando che $\langle N_{\uparrow} \rangle = \langle N_{\downarrow} \rangle$ otteniamo:

$$\Delta N^2 = 2 \langle N_{\uparrow}^2 \rangle + 2 \langle N_{\uparrow} N_{\downarrow} \rangle - 4 \langle N_{\uparrow} \rangle^2$$

Partiamo a calcolare il primo termine:

$$\begin{aligned} \langle N_{\uparrow} \rangle^2 &= \langle 0 | \prod_k (u_k + v_k c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}) \sum_{h,h'} c_{h\uparrow}^{\dagger} c_{h\uparrow} c_{h'\uparrow}^{\dagger} c_{h'\uparrow} \prod_l (u_l + v_l c_{l\uparrow}^{\dagger} c_{l\downarrow}^{\dagger}) | 0 \rangle \\ &= \sum_h \langle 0 | (u_h + v_h c_{-h\downarrow} c_{h\uparrow}) c_{h\uparrow}^{\dagger} c_{h\uparrow} c_{h\uparrow}^{\dagger} c_{h\uparrow} (u_h + v_h c_{h\uparrow}^{\dagger} c_{-h\downarrow}^{\dagger}) | 0 \rangle + \\ &\quad + \sum_{\substack{h,h' \\ h \neq h'}} \langle 0 | (u_h + v_h c_{-h\downarrow} c_{h\uparrow}) (u_{h'} + v_{h'} c_{h'\uparrow} c_{-h'\downarrow}) n_{h\uparrow} n_{h'\uparrow} (u_{h'} + v_{h'} c_{h'\uparrow}^{\dagger} c_{-h'\downarrow}^{\dagger}) (u_h + v_h c_{-h\downarrow}^{\dagger} c_{h\uparrow}^{\dagger}) | 0 \rangle \\ \langle N_{\uparrow} \rangle^2 &= \sum_h v_h^2 + \sum_{\substack{h,k \\ h \neq k}} v_h^2 v_k^2 = \sum_{h,k} v_h^2 v_k^2 + \sum_h (v_h^2 - v_h^4) \end{aligned}$$

Dove sfruttiamo la proprietà

$$n_{k\sigma} c_{k\sigma} = 1 + c_{k\sigma}^{\dagger} n_{k\sigma}$$

E consideriamo gli operatori che agiscono su diversi k come operatori di spazii Hilbert prodotto tensoriale tra di loro, quindi indipendenti. Allo stesso modo possiamo calcolare l'altro valore atteso:

$$\begin{aligned} \langle N_{\uparrow} N_{\downarrow} \rangle &= \langle 0 | \prod_k (u_k + v_k c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}) \sum_{h,h'} c_{h\uparrow}^{\dagger} c_{h\uparrow} c_{h'\downarrow}^{\dagger} c_{h'\downarrow} \prod_l (u_l + v_l c_{l\uparrow}^{\dagger} c_{l\downarrow}^{\dagger}) | 0 \rangle \\ &= \sum_{h,k} \langle 0 | (u_k + v_k c_{k\downarrow} c_{-k\uparrow}) (u_h + v_h c_{-h\downarrow} c_{h\uparrow}) n_{h\uparrow} n_{k\downarrow} (u_h + v_h c_{h\uparrow}^{\dagger} c_{-h\downarrow}^{\dagger}) (u_k + v_k c_{-k\uparrow}^{\dagger} c_{k\downarrow}^{\dagger}) | 0 \rangle \\ &= \sum_k \langle 0 | (u_k + v_k c_{k\downarrow} c_{-k\uparrow}) n_{-k\uparrow} n_{k\downarrow} (u_k + v_k c_{-k\uparrow}^{\dagger} c_{k\downarrow}^{\dagger}) | 0 \rangle + \\ &\quad + \sum_{\substack{k,h \\ k \neq -h}} \langle 0 | (u_k + v_k c_{k\downarrow} c_{-k\uparrow}) (u_h + v_h c_{-h\downarrow} c_{h\uparrow}) n_{h\uparrow} n_{k\downarrow} (u_h + v_h c_{h\uparrow}^{\dagger} c_{-h\downarrow}^{\dagger}) (u_k + v_k c_{-k\uparrow}^{\dagger} c_{k\downarrow}^{\dagger}) | 0 \rangle \\ \langle N_{\uparrow} N_{\downarrow} \rangle &= \sum_k v_k^2 + \sum_{\substack{h,k \\ h \neq -k}} v_k^2 v_h^2 = \sum_{h,k} v_k^2 v_h^2 + \sum_k (v_k^2 - v_k^4) \end{aligned}$$

Notiamo che $\langle N_{\uparrow} N_{\downarrow} \rangle = \langle N_{\uparrow}^2 \rangle$

Calcoliamo la fluttuazione

$$\begin{aligned} \Delta N^2 &= 4 \Delta N_{\uparrow}^2 = 4 \left[\sum_{kh} v_k^2 v_h^2 + \sum_k (v_k^2 - v_k^4) - \sum_k v_k^2 \sum_h v_h^2 \right] = \\ &= 4 \sum_k (v_k^2 - v_k^4) = 4 \sum_k v_k^2 (1 - v_k^2) = 4 \sum_k v_k^2 u_k^2 \end{aligned}$$

Dove abbiamo sfruttat la condizione

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

Da cui la fluttuazione è:

$$\Delta N^2 = 4 \sum_k u_k^2 v_k^2 = \sum_k \frac{\Delta^2}{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}$$

Possiamo stimarla facendo l'approssimazione del continuo:

$$\Delta N^2 = \frac{\overbrace{\Omega}^N}{2\pi^3} \int d\omega \frac{N(\omega)\Delta^2}{\omega^2 + \Delta^2}$$

L'integrale converge perché $N(\omega) \sim \sqrt{\omega}$.

Da cui abbiamo

$$\Delta N^2 \sim N$$

Che ci da la statistica poissoniana del numero di elettroni:

$$\frac{\Delta N}{N} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Se N è grande, come avviene nei sistemi tradizionali, allora questa distribuzione è molto piccata attorno ad N^* , e per tutti gli osservabili che non mutano il numero di elettroni si comporta come se ci fossero N^* elettroni.

Immaginiamo di riscrivere la funzione d'onda come:

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n |\phi\rangle_n \quad \sum_n \lambda_n = 1$$

Dove $|\phi\rangle_n$ è la funzione con n coppie di Cooper.

A qesto punto un osservabile che non modifica il numero di elettroni avrà valor atteso:

$$\langle F \rangle = \sum_n \lambda_n \langle \phi_n | F | \phi_n \rangle = \langle \phi_{N^*} | F | \phi_{N^*} \rangle \sum_n \lambda_n = \langle \phi_{N^*} | F | \phi_{N^*} \rangle$$

Dove Assumiamo $F(N)$ avere una variazione molto lenta rispetto a $\lambda(N)$, che è vero per $N \rightarrow \infty$.

A differenza però di un liquido di Fermi, ora anche operatori che modificano il numero di elettroni hanno valore atteso non nullo all'interno di un superconduttore. Supponiamo che l'osservabile G modifichi di p il numero di elettroni nel sistema, otteniamo:

$$\langle G \rangle = \sum_n \lambda_n \langle \phi_{n+p} | G | \phi_n \rangle + c.c. = \langle \phi_{N^*+p} | G | \phi_{N^*} \rangle \sum_n \lambda_n = \langle \phi_{N^*+p} | G | \phi_{N^*} \rangle$$

4.4 Temperatura finita

Fino a questo momento abbiamo studiato cosa prevede la teoria BCS a temperatura nulla, ossia le caratteristiche fisiche della funzione d'onda BCS di stato fondamentale.

A temperatura T diversa da zero però iniziano a diventare importanti le eccitazioni bogoloniche. Queste sono eccitazioni fermioniche che corrispondono alla rottura delle coppie di Cooper.

Indichiamo ora con η_k la dispersione dell'eccitazione bogolonica, come già visto nell'equazione (4.5).

$$\eta = \sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}$$

Ora siccome l'hamiltoniana BCS di campo medio è un oscillatore di Fermi:

$$H_{BCS}^{MF} = \sum_{k\sigma} \eta_k b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma} + C$$

Le eccitazioni bogoloniche soddisfano la statistica di Fermi-Dirac:

$$n_k = \frac{1}{e^{\frac{\eta_k}{k_b T}} + 1} \quad (4.7)$$

A differenza del mare di Fermi, che ha un'energia di Fermi dovuta alla presenza di un numero fissato di elettroni, le eccitazioni bogoloniche a $T = 0$ non ci sono, pertanto non esiste nessuna energia di fermi.

Ora possiamo riscrivere la *gap equation* anche nel caso di $T > 0$. Riscriviamo l'equazione (4.4):

$$1 = \frac{g}{2V} \sum_k \frac{1 - 2n_k}{\eta_k}$$

Sostituiamo la statistica di Fermi (4.7) e facciamo l'approssimazione del continuo:

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{g}{2} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\omega N(\omega) \frac{1 - 2 \left(e^{\frac{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}}{k_b T}} + 1 \right)^{-1}}{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}} \\ &= \frac{g}{2} N(0) \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}} \frac{e^{\frac{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}}{k_b T}} - 1}{e^{\frac{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}}{k_b T}} + 1} \\ &= \frac{g}{2} N(0) \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}} \tanh \left(\frac{\sqrt{\omega^2 + \Delta^2}}{2k_b T} \right) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Questa equazione torna ad essere la *gap equation* a $T = 0$ nel limite in cui $T \rightarrow 0$ e quindi la $\tanh(x) \rightarrow 1$. Cerchiamo ora la temperatura critica del superconduttore, ovvero la temperatura tale per cui la *gap* è nulla ($\Delta(T_c) = 0$) e approssimiamo l'integrale:

$$1 \approx \frac{g}{2} N(0) \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\omega}{\omega} \tanh \left(\frac{\omega}{2k_b T} \right)$$

Sfruttiamo il fatto che l'integrando è pari, e facciamo il cambio di variabile

$$\begin{aligned} x &= \frac{\omega}{2k_b T_c} \\ 1 &= gN(0) \int_0^{\frac{\omega_c}{2k_b T_c}} \frac{dx}{x} \tanh(x) \end{aligned}$$

Integriamo per parti, e teniamo a mente che $k_b T_c \ll \omega_c$ (ω_c è l'energia scambiata dagli elettroni, dell'ordine della frequenza di Debaye). L'integrazione per parti è necessaria per poter far tendere l'estremo di integrazione superiore all'infinito, infatti la funzione integranda, per grandi valori di x , si comporta come $1/x$, il cui integrale diverge per $x \rightarrow \infty$.

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{\omega_c}{2k_b T_c}} \frac{dx}{x} \tanh(x) &= \ln\left(\frac{\omega_c}{2k_b T_c}\right) \tanh\left(\frac{\omega_c}{2k_b T_c}\right) - \int_0^{\frac{\omega_c}{2k_b T_c}} dx \frac{\ln x}{\cosh^2(x)} \\ &\approx \ln\left(\frac{\omega_c}{2k_b T_c}\right) - \int_0^{\infty} dx \frac{\ln x}{\cosh^2(x)} \\ &\approx \ln \omega_c - \ln(2k_b T_c) + \ln \frac{4\gamma}{\pi} \end{aligned}$$

Dove abbiamo sfruttato l'approssimazione dell'integrale

$$\int_0^{\infty} \frac{\ln x}{\cosh^2 x} dx \approx -\ln \frac{4\gamma}{\pi} \quad \gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \ln n \right)$$

Sostituendo nella *gap equation* si ottiene la temperatura critica del superconduttore:

$$\begin{aligned} 1 &= gN(0) \ln \frac{4\gamma\omega_c}{2\pi k_b T_c} \\ k_b T_c &= \frac{2\gamma\omega_c}{\pi} e^{-\frac{1}{gN(0)}} = \frac{\gamma}{\pi} \Delta_0 \end{aligned} \quad (4.9)$$

Per calcolare la *gap* $\Delta(T)$ in funzione della temperatura occorre risolvere l'integrale in (4.8), e risolvere l'equazione di self-consistenza. Questo viene fatto numericamente. Una funzione analitica che bene approssima questa *gap* è la seguente:

$$\Delta(T) = \Delta_0 \sqrt{1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^3}$$

Una volta che sono noti Δ e η_k è possibile ricavare tutte le grandezze termodinamicamente interessanti, come il calore specifico, che si comporta a piccole T

$$c_s(T) \sim T^{-\frac{3}{2}} e^{-\Delta_0/k_b T} \quad T \ll T_c$$

Capitolo 5

Condensazione di Bose-Einstein e Superfluidità

Superconduttività e superfluidità sono cugine, ma non sorelle stette. La superfluidità può essere un po' capita grazie alla condensazione di Bose-Einstein, anche se i dettagli della superfluidità esulano dalla trattazione rozza della condensazione di Bose-Einstein.

Facciamo un po' di storia.

Nel 1908 c'è la prima liquefazione dell'Elio 4 a 4.2 Kelvin. Grazie a K. Omnes inizia la fisica delle basse temperature, che ha permesso di scoprire sia superconduttività e superfluidità. La scienza ha fatto grossi passi avanti in quando c'è stato in precedenza un grosso avanzamento tecnologico come in questo caso. Nel 1911 è stata scoperta la superconduttività, nel 1925 viene predetta da Bose e Einstein la condensazione bosonica. Nel 1927 viene identificata la λ transition dell'Helio 4 (bosone) a 2.2 K. Questo è l'inizio della superfluidità. La superfluidità riguarda gli atomi, mentre la superconduttività parla di elettroni. C'è un enorme differenza perché i nuclei atomici sono quasi tutti classici, infatti l'elio è l'unico elemento con fluttuazioni quantistica comparabili alla temperatura, a temperature apprezzabilmente grande. Nel 1933 c'è la scoperta dell'effetto Meissner SC. Nel 1938 viene dimostrata la superfluidità nell'Elio 4 rigorosamente. Nel 1950 inizia la teoria di Landau-Ginzburg, è una teoria di campo medio con la possibilità di non omogeneità. Nel 1957 arriva la famosa teoria BCS, e insieme viene inventato il reticolo di Abrikosof, che descrive i superconduttori di tipo II. Questo fatto rende il sistema molto più robusto, permettendo delle rotture locali della superconduttività che fa penetrare il campo magnetico nel materiale mantenendo lo stato superconduttivo. Nel 1963 viene identificato il meccanismo di Anderson-Higgs. La superconduttività può essere vista come una rottura di simmetria di Gauge esattamente come il bosone di Higgs. Il meccanismo matematico che c'è dietro è abbastanza simile. Nel 1971 la superfluidità viene scoperta anche in Elio 3 a temperatura critica di $T_c = 2.8$ mK. Qui ci si avvicina a BCS, avviene la formazione di coppie di nuclei, che condensano proprio come nella superconduttività. Nel 1986 sono scoperti gli ossidi cuprati, poi tanti altri tipi di composti. Nel 2015 è arrivato il nuovo breakthrough,

con H_3S superconduttore ad alte pressione con $T_c = 203$ K. Nel 1995 è stata scoperta la condensazione di Bose-Einstein in gas atomici freddi a $T_c = 0.5\mu\text{K}$.

Per studiare questi sistemi viene usato il confinamento tramite laser, che crea un potenziale di raccolta, in grado di isolare pochi atomi, che possono essere raffreddati in modo da controllare la densità, usando la condensazione di Bose-Einstein (questo è interessante perché permette di manipolare la densità).

Sia superconduttività che superfluidità sono effetti quantistici che appaiono a scale macroscopiche a bassa temperatura.

5.1 Condensazione di Bose Einstein

I fononi rispettano la statistica dei Bose-Einstein, tuttavia non sono in grado di fare una condensazione di Bose. Per avere condensazione, occorre fissare il numero N di bosoni. Questo può avvenire se i bosoni di cui parliamo sono ad esempio atomi di Elio, ma non se sono fotoni e fononi.

La fondamentale differenza tra la coerenza di un laser, e la coerenza della superconduttività è che la coerenza del laser è ottenuta a causa di una situazione di non equilibrio che genera l'inversione della popolazione, mentre la superconduttività è uno stato spontaneo del sistema nel suo stato fondamentale.

5.1.1 Statistica di BE per sistema di N atomi

Ricaviamo ora la statistica di Bose-Einstein nel caso di N atomi. Rispetto alla statistica di Plank questo aggiunge il potenziale chimico. Sia N_s il numero di bosoni identici che descrivono il sistema. Abbiamo M_s stati quantistici in cui possono stare.

Il nostro sistema ha N particelle, suddivise in S stati energetici, ciascuno dei quali ha M_s degenerazioni e N_s particelle, ed energia ε_s (per particella).

Su ciascun livello energetico s il numero di modi di riordinare le N_s particelle che contiene sulle M_s degenerazioni (che hanno tutte la stessa energia) è lo stesso di riordinare N_s particelle in M_s scatole:

$$W_s = \frac{(N_s + M_s - 1)!}{N_s!(M_s - 1)!}$$

L'entropia del sistema è (definizione di Boltzmann):

$$S = k_B \ln W$$

Il numero di configurazioni totali è dato dal prodotto del numero di possibili configurazioni su ciascuno stato energetico s :

$$W = \prod_s W_s = \prod_s \frac{(N_s + M_s - 1)!}{N_s!(M_s - 1)!}$$

Facciamo l'approssimazione di Stirling

$$\ln N \approx N \ln N - N$$

$$S = k_b \ln W = k_b \sum_s [(N_s + M_s) \ln(N_s + M_s) - N_s \ln N_s - M_s \ln M_s]$$

Con l'ipotesi che $N_s \gg 1$ e $M_s \gg 1$.

All'equilibrio dobbiamo massimizzare l'entropia totale, con dei vincoli. Il numero totale di particelle deve essere fisso, ma anche l'energia totale del sistema:

$$N = \sum_s N_s \quad U = \sum_s \varepsilon_s N_s$$

Usiamo i moltiplicatori di Lagrange che mantengono costanti N e U , per semplicità li chiamiamo direttamente con il loro significato fisico, anche se questo sarà tra pochi passaggi ($k_b\beta$ e $k_b\beta\mu$):

$$\frac{\partial S}{\partial N_s} - k_b\beta \frac{\partial U}{\partial N_s} + k_b\beta\mu \frac{\partial N}{\partial N_s} = 0 \quad (5.1)$$

Da cui otteniamo:

$$\ln(N_s + M_s) - \ln N_s - \beta\varepsilon_s + \beta\mu = 0$$

$$N_s = \frac{M_s}{e^{\beta(\varepsilon_s - \mu)} - 1}$$

Da cui ricaviamo la Bose-Einstein:

$$f_{BE}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1}$$

Adesso sfruttiamo la prima legge della termodinamica per dimostrare il legame tra i moltiplicatori di Lagrange usati in teoria microscopica e le quantità termodinamiche macroscopiche, per dimostrare che l'aver usato β e μ nei moltiplicatori di Lagrange non è stato un abuso di notazione:

$$dU = TdS - PdV + \mu dN$$

$$dS = \frac{1}{T} (dU + PdV - \mu dN)$$

Dalla termodinamica segue che:

$$dS = k_b\beta (dU - \mu dN)$$

Ma questa stessa relazione la possiamo riottenere applicando l'equazione (5.1).

$$dS = \sum_s \frac{\partial S}{\partial N_s} dN_s = k_b\beta \sum_s \left(\frac{\partial U}{\partial N_s} - \mu \frac{\partial N}{\partial N_s} \right) dN_s$$

Da cui si dimostra l'effettivo legame tra β e μ microscopici e gli analoghi significati termodinamici.

L'espressione di μ adesso è abbastanza complicata, avendolo introdotto come moltiplicatore di Lagrange, il suo significato è quello di porre un vincolo al numero di atomi nel sistema. In questa definizione di μ sta la magia della condensazione di Bose-Einstein, che pertanto è possibile solo in sistemi in cui il numero di particelle è fisso (almeno per come è descritto da questa teoria).

La transizione di Bose Einstein è esattamente una transizione di fase termodinamica per particelle **non interagenti**. Questa è la cosa geniale della Bose-Einstein, non c'è bisogno di nessuna interazione, è una transizione di fase puramente configurazionale.

Il numero di particelle si esprime sommando su tutti gli stati la statistica di Bose-Einstein:

$$N = \sum_k \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1}$$

Facciamo andare $V \rightarrow \infty$ e otteniamo:

$$N = \int \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1}$$

Da cui otteniamo

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3k}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1}$$

Introduciamo la densità degli stati

$$g(\varepsilon) = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \varepsilon^{1/2} \quad 3 \text{ dimensioni}$$

Possiamo passare dall'integrale in k all'integrale in ε . Introducere la quantità adimensionale $z = e^{\beta\mu}$ detta fugacità, e la variabile x definita:

$$x = \beta\varepsilon$$

$$N = \frac{(mk_bT)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty \frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}} x^{1/2} dx$$

Già da questo si nota subito che c'è una criticità nella convergenza di questo integrale dal valore di z . In particolare se z è maggiore 1 esiste un valore di x positivo (quindi interno all'intervallo di integrazione) per il quale il denominatore si annulla.

Nel caso in cui $z < 1$ possiamo riscrivere l'integrando attraverso la serie geometrica:

$$\frac{ze^{-x}}{1 - ze^{-x}} = ze^{-x} (1 + ze^{-x} + z^2e^{-2x}) = \sum_{p=1}^{\infty} z^p e^{-px}$$

In questo caso l'integrale diventa:

$$\int_0^\infty e^{-px} x^{1/2} dx = \frac{1}{p^{3/2}} \int_0^\infty e^{-y} y^{1/2} dy = \frac{1}{p^{3/2}} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

L'integrale è la funzione Γ di Eulero. Da cui la densità di particelle diventa:

$$n = \frac{mk_bT}{2\pi\hbar^2} g_{3/2}(z) \quad (5.2)$$

$$g_{3/2}(z) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{z^p}{p^{3/2}}$$

Questa serie converge solo per $z < 1$.

Dobbiamo connettere μ ad N . Abbiamo che N è pari a:

$$N = \left(\frac{mk_bT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} g_{3/2}(z)$$

Con

$$g_{3/2}(z) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{z^p}{p^{3/2}}$$

Nel caso $z = 1$ è marginalmente divergente:

$$g_{3/2}(1) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^{3/2}} = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612$$

Dove la ζ è la funzione di Riemann

$$\zeta(s) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^s}$$

$$\frac{dg_{3/2}(z)}{dz} = \frac{1}{z} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{z^p}{p^{1/2}}$$

Invertendo la relazione (5.2) si ottiene

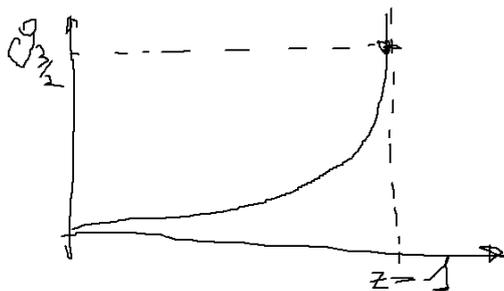


Figura 5.1: Andamento della funzione $g_{3/2}(z)$ in prossimità di $z = 1$.

$$g_{3/2}(e^{\beta\mu}) = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_bT}\right)^{3/2} n$$

Quindi questa è una definizione implicita di μ . Se z è piccolo T è grande. Ad alte temperature si può espandere la funzione:

$$g_{3/2}(z) \approx z$$

Da cui risolviamo:

$$\mu \approx -\frac{3}{2}k_bT \ln\left(\frac{mk_bT}{2\pi\hbar^2 n^{2/3}}\right)$$

Questa è l'espansione delle alte temperature.

In Figura 5.2 è riportato l'andamento del potenziale chimico in funzione della temperatura.

Esiste un punto in cui $\mu = 0$, associato a quel punto c'è una transizione di fase.

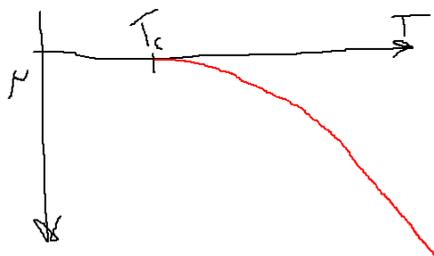


Figura 5.2: Andamento del potenziale chimico, c'è una transizione di fase ad una certa temperatura critica T_c .

Il valore di z può crescere solo fino a $z = 1$. Vediamo se $z = 1$ cosa succede al sistema. Questo avviene se $\mu = 0$

$$g_{\frac{3}{2}}(1) = 2.612$$

A questo punto esiste una temperatura a cui succede qualcosa di drastico:

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{k_b m} \left(\frac{n}{2.612} \right)^{\frac{2}{3}}$$

Esiste un T finito a cui il sistema ha una transizione di fase termodinamica.

L'instabilità significa che ci sarà un numero finito (dell'ordine di N) che sta tutto in uno stato. Quindi l'approssimazione del continuo fatta in questa descrizione non va più bene.

Possiamo fare il seguente argomento. Abbiamo due elettroni che si accoppiano in spazio reale, fanno dei bosoni che possono condensare Bose-Einstein. Questo effettivamente avviene nell'elio 3. Se facciamo questo c'è il problema che per farli condensare serve molta interazione di bipolarone, Quindi m sarebbe grossa. E T_c dipende dall'inverso da m .

Questo insieme a BCS è un grande canone della storia della superconduttività. Le due strade si eguagliano per sistemi diluiti, in cui l'energia di Fermi è comparabile a $\hbar\omega$ anche in BCS tutti gli elettroni si accoppiano. Esiste un modo di connettere le due cose formale in questa ipotesi:

$$k_b T_c = \hbar\omega_D e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad \lambda \sim \frac{g^2 N(\varepsilon_F)}{\omega_0} \quad \text{BCS}$$

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{k_b m} \left(\frac{n}{2.612} \right)^{\frac{2}{3}} \quad \text{Bose Condensation}$$

5.1.2 Comportamento del condensato

Abbiamo lo stato $\varepsilon_k = 0$ fondamentale. Vediamo qual è l'occupazione dello stato:

$$N_0 = \frac{1}{e^{-\beta\mu} - 1}$$

$$\mu = -k_b T \ln \left(1 - \frac{1}{N_0} \right) \approx -k_b T \frac{1}{N_0}$$

Quindi per $\mu \rightarrow 0$ abbiamo che $N_0 \rightarrow \infty$

Lo stato fondamentale quindi non può essere incluso nell'integrale, ma va trattato separatamente. Sotto T_c abbiamo una rottura della descrizione standard, e bisogna considerare esplicitamente lo stato fondamentale:

$$N = N_0 + \sum_{k \neq 0} \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_k} - 1} \quad \mu = 0$$

Passiamo all'integrale:

$$n = n_0 + \frac{(mk_b T)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_{0+}^{\infty} \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} x^{\frac{1}{2}} dx$$

Questo stato guadagna in energia ma perde in entropia rispetto a quello di prima. L'integrale può essere fatto e viene

$$n = n_0 + 2.612 \left(\frac{mk_b T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

Dividiamo tutto per n totale e sostituiamoci la formula ottenuta in precedenza (in funzione della temperatura critica) e otteniamo:

$$\frac{n_0}{n} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}}$$

Questa è la classica firma di una transizione di fase del secondo ordine. Possiamo calcolare l'energia

$$U = V \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon g(\varepsilon) d\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1}$$

$$U = V (k_b T)^{\frac{5}{2}} \frac{m^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}} \int_0^{\infty} \frac{z e^{-x} x^{\frac{3}{2}}}{1 - z e^{-x}} dx$$

$$u = \frac{U}{V} = \frac{3}{2} k_b T \frac{g_{\frac{5}{2}}(z)}{g_{\frac{3}{2}}(z)} \quad T > T_c$$

Sotto la temperatura critica abbiamo:

$$u = \frac{3}{2} k_b \frac{T^{\frac{5}{2}} g_{\frac{5}{2}}(1)}{T_c^{\frac{3}{2}} g_{\frac{3}{2}}(1)} \quad T < T_c$$

Per temperatura molto alta

$$u \sim \frac{3}{2} k_b T$$

Che è il teorema dell'equipartizione.

Dallo studio del calore specifico possiamo verificare che effettivamente questo T_c rappresenta una vera transizione di fase.

$$c_v = \frac{\partial U}{\partial T}$$

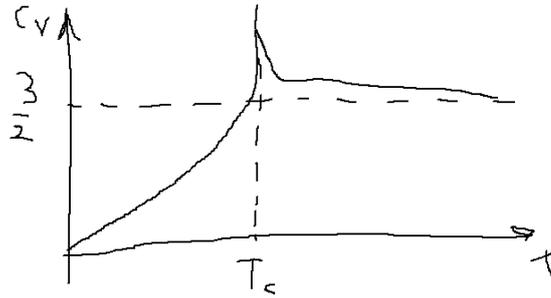


Figura 5.3: Andamento del calore specifico in una transizione di Bose-Einstein.

Per $T < T_c$

$$c_v = \frac{15}{4} \frac{g_{\frac{5}{2}}(1)}{g_{\frac{3}{2}}(1)} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{3}{2}} k_b$$

Abbiamo sorvolato la questione matematica dello 0^+ come limite di integrazione. Consideriamo la somma su k . In una scatola cubica k ha una spaziatura del tipo

$$k \approx \frac{2\pi}{L}$$

$$\varepsilon_k \approx \frac{\hbar^2}{mL^2} = V^{-\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m}$$

$$N_1 = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{k_1} - \mu)} - 1} = \frac{1}{e^{\beta V^{-\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{m}} - 1}$$

Nel limite $V \rightarrow \infty$ otteniamo

$$N_1 \sim O(V^{\frac{2}{3}})$$

Il numero di occupazione dello stato fondamentale invece è proporzionale al volume per $T < T_c$, infatti come abbiamo visto, è dello stesso ordine del numero di particelle, e $N \sim V$. Questo vuol dire nel limite termodinamico :

$$\frac{N_1}{N_0} \sim \frac{1}{\sqrt[3]{V}} \rightarrow 0$$

Quindi effettivamente N_1 è trascurabile rispetto a N_0 . Si può mostrare che N_1 invece ha lo stesso ordine in V di N_i con $i > 1$, per cui ha senso fare l'approssimazione del continuo.

5.2 Condensazione di Bose-Einstein nei gas di atomi freddi

Se prendiamo l'elio 4, la previsione della temperatura critica di Bose Einstein $T_c = 3.1$ K, mentre quella realmente misurata è $T_c = 2.2$ K. A prima vista potrebbe sembrare un grosso risultato, in realtà alla fine è solo culo.

La prima verifica della condensazione di Bose-Einstein è stata fatta nel 1995 con il Cold-Atomic-Gasses. Con dei fasci laser si possono creare delle buche di potenziale a piacere, con un'ingegneria molto spinta. Possiamo mettere il numero di atomi che vogliamo. Possiamo freddarlo con il metodo dell'evaporazione (gli atomi più caldi scappano). Grazie al controllo degli atomi possiamo arrivare a densità molto piccole (10^{11}cm^{-3}) Per il

$${}^{87}\text{Rb} \quad T_c^{(BEC)} \sim 10^{-6} - 10^{-8}\text{K}$$

Come fa un grosso atomo ad essere un bosone? Il Rubidio è un metallo alcalino. Abbiamo un elettrone spaiato. Lo spin nucleare è semi intero. Per i metalli alcalino

$$S = \frac{3}{2}$$

La composizione degli spin nucleari o elettronici possono avere tutti i valori. tra 1 e 2.

Anche questi interagiscono per interazione a corto range. La condensazione di Van Der Waals avviene, ma a velocità molto bassa. Esiste un tempo in cui questo oggetto assomiglia alla Bose-Einstein condensation.

5.3 Volume escluso

Aggiungiamo un potenziale di volume escluso:

$$V(r_1 - r_2) = g\delta(r_1 - r_2)$$

Questo vuol dire che non possono occupare tutti lo stesso spazio. Si può fare un calcolo di campo medio, introducendo un potenziale efficace del tipo:

$$V_{eff}(r) = gn(r)$$

Dove n è la densità

$$n(r) = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} |\psi_i(r)|^2$$

ψ è la funzione d'onda macroscopica. Questo è un approccio simile a Landau-Ginzburg. Possiamo scrivere un'equazione di Schroedinger per la funzione d'onda macroscopica:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) + V_{eff}(r) \right] \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r)$$

Questa è un'equazione di Schroedinger non lineare, perché V_{eff} contiene a sua volta la ψ funzione d'onda. Possiamo ripetere le argomentazioni della condensazione di Bose Einstein.

$$N = \int n(r) d^3r = \sum_i \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1}$$

Dove ε è fissato dall'equazione di Schroedinger non lineare. Questo va risolto in modo numerico.

$$n(r) = N |\psi_0(r)|^2$$

Questa equazione è detta di Gross-Pitaiewski. In funzione del coefficiente g si avrà una modifica del comportamento. Questo tipo di interazione, che inizia ad introdurre un volume proprio per gli atomi, provoca solo una modifica di equilibrio tra vari stati del sistema, rendendo comunque possibile la condensazione di Bose-Einstein.

Nella trappola del potenziale laser il numero di atomi può essere anche molto piccolo, di tipo 10^4 o 10^6 . Per studiare la condensazione si può osservare il comportamento in velocità degli atomi. Quello che si fa è rilassare la trappola laser, e studiare la distribuzione di velocità con cui gli atomi escono dalla trappola. Le particelle negli stati eccitati hanno velocità distribuita secondo Maxwell-Boltzmann, mentre quelle condensate sono distribuite con una delta di Dirac (allargata dal principio di indeterminazione).

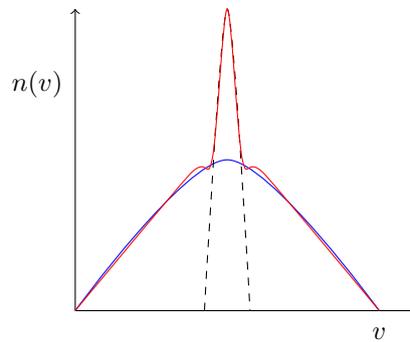


Figura 5.4: Abbiamo in blu il caso $T > T_c$, rosso $T < T_c$ la distribuzione delle velocità. Nel caso $T < T_c$ abbiamo la somma tra le velocità dello stato fondamentale (tratteggiato) che sono una frazione finita del totale degli atomi, e quelle degli altri stati eccitati, che sono ancora distribuite con Maxwell-Boltzmann.

La larghezza finita della lunghezza è dovuta al principio di indeterminazione

$$\Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x}$$

Abbiamo la distribuzione di Maxwell insieme alla distribuzione quantistica. Le larghezze delle distribuzioni sono dati dalle due fluttuazioni distinte:

$$\Delta v \sim \left(\frac{k_b T}{m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{Componente Maxwelliana}$$

$$\Delta v \sim \left(\frac{\hbar}{m \Delta x} \right) \quad \text{Componente del condensato}$$

Si può mostrare il caso ideale di Bose-Einstein condensation è significativamente diverso dal caso della superfluidità. Bisogna introdurre delle interazioni più forti tra atomi per avere una vera superfluidità. Solo con le interazioni tra atomi si possono formare correnti persistenti all'interno.

5.3.1 Stabilità della fase solida

La superfluidità fu osservata per la prima volta anche 3He e 4He . Sono gli unici che riusciamo a osservare perché sono gli unici ad avere un liquido per

$T = 0\text{K}$. Questo è dovuto sia alla leggerezza dell'elio, che alla scarsa interazione tra atomi.

Nel liquido abbiamo più ΔS , mentre nel solido abbiamo più ΔU . L'idea è che le fluttuazioni termiche favoriscono l'entropia. In realtà gli atomi non si muovono solo per fluttuazioni termiche, ma anche di tipo quantistico. Quindi le fluttuazioni di punto zero dell'elio sono così grandi da distruggere la fase solida dell'elio, impedendone la cristallizzazione anche a $T = 0$. L'elio 4 fa la superfluidità a 2.17 K. Mentre l'elio 3 nel 72 è stato mostrato superfluido a 2 mK.

Immaginiamo di avere un solido. Vogliamo capire fin dove è stabile. Per essere rigorosi, la transizione liquido solido è una transizione del primo ordine. Non è una transizione critica, non ha universalità. Bisognerebbe fare un calcolo dettagliato dell'energia libera del liquido e del solido, rozzo. Quando scriviamo

$$V(r_1 - r_2) \sim eV \sim 11000\text{K}$$

La differenza di energia libera tra solido e liquido è dell'ordine del Kelvin. Quindi occorre un calcolo dettagliatissimo. Ci sono degli aspetti comunque interessanti. Se guardassimo l'energia libera del solido e del liquido, vedremo delle curve.

Il sottoraffreddamento del liquido è possibile, ma non è possibile il surriscaldamento del solido. Il solido ha delle superfici. La stabilità di un bulk di solido è diverso dalle superfici. L'atomo della superficie è meno stabile, quindi un solido per la superficie ha sempre un canale della stabilità.

Per la stabilità dei solidi è bene che ciascun atomo sia ben localizzato. Se schematizziamo un potenziale abbiamo un potenziale del tipo sinusoidale. Il potenziale non è quadratico. Possiamo avere il potenziale a coppie:

$$V(r_1, r_2) = V_0 + \frac{\partial V}{\partial r} \Delta r + \frac{\partial^2 V}{\partial r^2} \Delta r^2 + \frac{\partial^3 V}{\partial r^3} \Delta r^3 \dots$$

Se facessimo la teoria perturbativa potremmo avere il fonone che interagisce con altri fononi, potenziale cubico, potenziale quartico, se facciamo tutta la teoria perturbativa, non può venire la instabilità. La teoria perturbativa è intrinsecamente stabile. Per ottenere l'instabilità bisogna andare a casi non perturbativi. Una cosa non perturbativa è una storia di self-consistenza. La temperatura aumenta la singola fluttuazione, ma può anche abbassare la barriera di potenziale che va superata, a causa delle fluttuazione degli atomi vicini.

Questo concetto va scritto in un modellino. La costante della forza in un argomento self-consistente è funzione della temperatura

$$\tilde{k}_0(T) = \nabla^2 V(r)$$

La cosa più natruare da fare per ottenere questo oggetto è

$$\tilde{k}_0(T) = \langle \nabla^2 V(r) \rangle_T$$

Questo è una media termica. Possiamo quindi immaginare un potenziale sinusoidale:

$$V(r) = v_0 \cos q \cdot r = v_0 \Re e^{iqr}$$

La media termica di e^{iqr} è qualcosa dell'ordine

$$\langle e^{iqr} \rangle \sim e^{-\lambda \langle u^2 \rangle}$$

È il decadimento esponenziale della forza di richiamo dovuta alla fluttuazione del reticolo (Debye-Waller). Questo perché se supponiamo che il displacement abbiamo una dispersione armonica (gaussiana), la media termica che vogliamo valutare altro non è che la funzione caratteristica della gaussiana, che è un'altra gaussiana, di varianza proporzionale all'inverso della dispersione originale $\langle u^2 \rangle$:

$$\langle e^{iqr} \rangle = e^{-\alpha q^2 \langle u^2 \rangle}$$

Poiché q è fissato dal potenziale, ne includiamo la dipendenza in una costante λ moltiplicativa:

$$\langle e^{iqr} \rangle \rightarrow e^{-\lambda \langle u^2 \rangle}$$

Il potenziale effettivo dipendente dalla temperatura è

$$\tilde{K}(T) = k_0 e^{-2\lambda \langle u^2 \rangle_T}$$

Usiamo la equipartizione della energia:

$$\frac{1}{2} K_B T = \frac{1}{2} \tilde{K}(T) \langle u^2 \rangle$$

$$\langle u^2 \rangle = \frac{k_b T}{2k_0} e^{2\lambda \langle u^2 \rangle}$$

Questa è un'equazione autoconsistente per $\langle u^2 \rangle$. A bassa temperatura si espande bene:

$$\langle u^2 \rangle = \frac{k_b T}{k_0} (1 + 2\lambda_0 \langle u^2 \rangle + \dots)$$

Il primo termine è l'equipartizione dell'energia. Se facciamo un grafico di $\langle u^2 \rangle$ in funzione di $F(u^2)$:



Figura 5.5: La soluzione c'è solo fino ad una certa temperatura. Possiamo vedere la temperatura per cui esiste una sola soluzione.

La soluzione unica dell'equazione è

$$y = 2\lambda \langle u^2 \rangle \quad \tau = \frac{k_b T}{2k_0} \lambda$$

L'equazione diventa

$$y = \tau e^y$$

Il limite a punto di contatto si ha banalmente per

$$y_B = 1 \quad \tau_B = e^{-1}$$

Si può applicare questo stesso ragionamento alle fluttuazioni quantistica. Mettiamoci a $T = 0$, ma introduciamo il quantum zero point motion (fluttuazioni quantistiche). Per quali valori dei parametri si ha instabilità o meno.

L'energia del sistema potenziale del sistema è la metà dell'energia totale (in media).

$$\frac{1}{2} Nk(T) \langle u^2 \rangle = \frac{1}{2} \sum_s \hbar \omega_s \left(n_s + \frac{1}{2} \right)$$

A temperatura nulla rimane solo il punto zero, $n_s = 0$.

$$\frac{N}{2} K(T) \langle u^2 \rangle \stackrel{T=0}{=} \sum_s \frac{\hbar \omega_s}{4}$$

Il numero di modi¹ è pari a $3N$, ipotizzando che abbiano tutti la stessa frequenza si ottiene:

$$\begin{aligned} \frac{N}{2} K(T) \langle u^2 \rangle &= \frac{3N\hbar\omega}{4} \\ \langle u^2 \rangle &\approx \frac{3\hbar}{2M\omega} \quad \omega = \sqrt{\frac{k_0}{M}} \end{aligned}$$

L'equazione è più strana:

$$\langle u^2 \rangle = \frac{3\hbar}{2\sqrt{Mk_0}} e^{\lambda \langle u^2 \rangle}$$

Si ripete lo stesso ragionamento:

$$A = \frac{3\hbar\lambda}{2\sqrt{Mk_0}}$$

La condizione di stabilità della fase solida rispetto alle fluttuazioni quantistiche:

$$\frac{3\hbar\lambda}{2\sqrt{Mk_0}} < e^{-1}$$

Entrando un po' nel dettaglio (considerando l'interazione tra gli atomi delle forze di Van der Waals)

$$\begin{aligned} \lambda &= Ar_0^{-2} \quad r_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \\ k_0 &= B \frac{e^2}{r_0^2} \end{aligned}$$

Da cui viene fuori:

$$\sqrt{\frac{m}{M}} < \frac{1}{e} \frac{2\sqrt{B}}{3A}$$

Mettendoci i dati dell'elio otteniamo:

$$\sqrt{\frac{m_e}{m_p}} < 10^{-2}$$

Che effettivamente è vicino al limite reale. Se l'elettrone e il protone avessero masse più vicine significa che non sarebbe possibile fare solidi (quindi il positronio non può formare solidi).

¹Sarebbe $3N - 6$ gradi di libertà rototraslazionali, però $N \rightarrow \infty$.

5.4 Quantum Fluid

Quando un fluido è dominato da aspetti classici e quando da aspetti quantistici? Dipende dalle energie in campo e dalle interazioni. Abbiamo due casi, Elio e Neon, che invece è classico. In entrambi casi i potenziali tra gli atomi è del tipo Van deer Waals:

$$V(r) \approx ae^{-br} - \frac{c}{r^6} \quad V(r) \approx \varepsilon_0 \left(\frac{d^{(12)}}{r^{12}} - 2 \frac{d^{(6)}}{r^6} \right)$$

Per l'elio:

$$\varepsilon_0 = 1.03\text{meV} \quad d = 2.65 \quad m = 4n$$

Per il neon:

$$\varepsilon_0 = 3.94\text{meV} \quad d = 2.96 \quad m = 20n$$

L'hamiltoniana classica è del tipo

$$H(p_i, r_i) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(r_i - r_j)$$

$$P(p_1, \dots, p_n) = \frac{1}{Z_n} e^{-\beta H}$$

$$Z_n = \frac{1}{N!} \int d^3 p_1 \dots d^3 p_n e^{-\beta H}$$

Se abbiamo la distribuzione di Maxweel boltzman fattorizziamo le posizioni e gli impulsi:

$$Z_N = \int \prod_i \int \left(e^{\frac{-p_i^2}{2mk_b T}} dp_i \right) Q_N = (2\pi mk_b T)^{\frac{3N}{2}} Q_N$$

$$Q_N = \frac{1}{N!} \int dr_i^3 \exp \left(-\frac{1}{2} \beta \sum_{i \neq j} V(r_i - r_j) \right)$$

$$P(p) d^3 p = \frac{1}{(2\pi mk_b T)^{\frac{3N}{2}}} e^{-\frac{p^2}{2mk_b T}} d^3 p$$

Il tipico momento di una particella è

$$p = (2mk_b T)^{\frac{1}{2}}$$

Che è il massimo di questa distribuzione. Questo è il momento caratteristico termico della distribuzione. Con questa relazione calcoliamo la lunghezza quantistica di De-Broglie. Ovvero contiamo la lunghezza caratteristica del principio di indeterminazione dato il momento caratteristico:

$$\lambda_T = \left(\frac{2\pi \hbar^2}{mk_b T} \right)^{\frac{1}{2}}$$

Questa è la lunghezza d'onda termica di De-Broglie. Fatto questo giochetto possiamo calcolarla esplicitamente. Per il Neon si ha:

$$\lambda_T = 0.7\text{\AA} \quad d = 3\text{\AA}$$

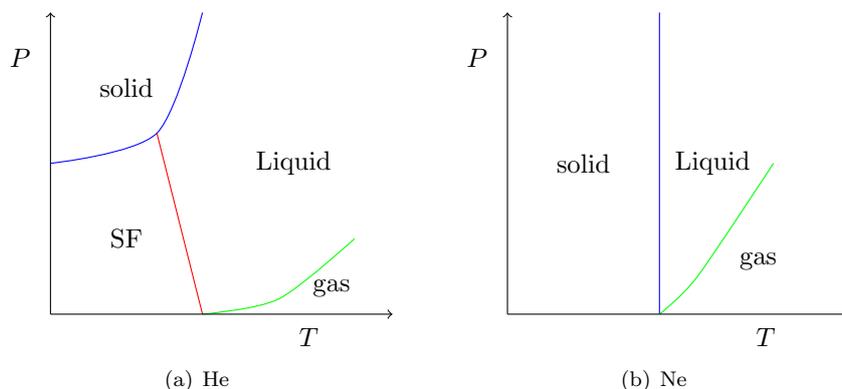


Figura 5.6: Diagrammi di fase di Elio e Neon. L'elio presenta una transizione di fase del secondo ordine da elio fluido a elio superfluido.

Quindi queste fluttuazioni sono irrilevanti per il neon.

$$\lambda_T = 4\text{\AA} \quad d = 2.7\text{\AA}$$

Dove d è il minimo dell'interazione. Quindi l'elio è un liquido quantistico, il Neon no. Questo è anche un secondo modo di vedere il fatto che l'elio è un liquido quantistico che è stabilizzato dalle fluttuazioni di punto zero. Il confronto tra il diagramma di fase di Elio e Neon a basse temperature è mostrato in Figura 5.6.

5.5 Superfluidità

Rispetto alla gas di atomi freddi, e alla condensazione di Bose-Einstein per atomi non interagenti, la transizione di fase superfluida dell'elio ha alcune differenze quantitative.

Ad esempio se si osserva il calore specifico a piccole temperature si scopre che questo ha un andamento come

$$c_s \sim T^3$$

Differente rispetto al $T^{\frac{3}{2}}$ che avevamo calcolato per il condensato di Bose-Einstein. Inoltre, in prossimità della temperatura critica, il calore specifico diverge logicamente, invece di avere una cuspide (Figura 5.7)

Questo comportamento fa supporre che la transizione superfluida sia nella stessa classe di universalità del modello dei ferromagneti, in cui abbiamo un parametro d'ordine identificato da un vettore a due componenti:

$$n(r) = (n_x(r), n_y(r))$$

In questo caso non possiamo più usare il modello di Gross-Pitawesky per risolvere il sistema, perché l'effetto del potenziale repulsivo è talmente forte da non poter essere trattato con la teoria efficace di campo medio, ma diventano importanti le interazioni locali del mezzo.

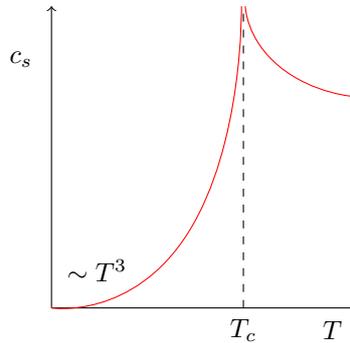


Figura 5.7: Divergenza del calore specifico in una transizione superfluida.

5.5.1 Teoria quantistica efficace per la Superfluidità

Per trattare il fenomeno della superfluidità da un punto di vista fenomenologico si può usare una teoria molto simile all'approccio di Landau-Ginzburg. Possiamo introdurre una funzione d'onda macroscopica per il sistema, e dire che la densità di particelle condensate nella fase superfluida è pari a:

$$n(r) = |\psi(r)|^2$$

La funzione d'onda possiamo scriverla quindi come:

$$\psi(r) = \sqrt{n(r)}e^{i\theta(r)}$$

L'aggiunta rispetto alla normale Bose-Einstein condensation (BEC) è la dipendenza della fase θ dalla posizione. Questa assunzione è analoga ad un modello planare di versori orientabili.

A questo punto possiamo usare la funzione d'onda macroscopica per calcolare la corrente di superfluido.

$$J_0 = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(r)\nabla\psi(r) - \psi(r)\nabla\psi^*(r)]$$

Sostituendo la funzione d'onda (ipotizzando che la densità sia uniforme):

$$J_0 = \frac{\hbar n}{m} \nabla\theta(r)$$

Da cui si evince che per avere una corrente non nulla la funzione d'onda deve dipendere da θ in modo non banale. Si può sfruttare questo risultato per calcolare la quantizzazione del flusso in un anello.

Immaginiamo di mettere il superfluido all'interno di un tubo, e calcolarne la circuitazione di corrente:

$$J = nv \quad v = \frac{\hbar}{m} \nabla\theta$$

$$k = \oint \vec{dl} \cdot \vec{v} = \oint \vec{dl} \cdot \vec{\nabla}\theta$$

Applicando il teorema del rotore otteniamo:

$$k = \frac{\hbar}{m} \Delta\theta + \hbar \int dS \vec{\nabla} \times \vec{\nabla}\theta$$

$$k = \frac{\hbar}{m} \Delta\theta$$

Poiché attraverso ogni giro la variazione della fase della funzione d'onda può essere al più pari a $2\pi n$, il flusso si quantizza in:

$$k_n = \frac{hn}{m}$$

Questo si può dimostrare con un esperimento, si mette in rotazione il tubo. Ruota solo il fluido normale, il superfluido no. Si raffredda il sistema, e questo fa sì che parte del fluido diventa superfluido, trasferendo momento angolare, che anche questo è quantizzato.

Effetto fontana

Tra le caratteristiche interessanti della superfluidità c'è la conducibilità termica che diverge e la viscosità che diventa nulla. Quest genera un effetto interessante quando si mischiano due superfluidi a temperature diverse, collegati tra loro da un capillare.

All'equilibrio si deve equivalere l'energia libera e il potenziale chimico dei due superfluidi:

$$dG = -SdT + VdP = 0$$

$$SdT = VdP \quad s = \frac{S}{V}$$

$$dP = sdT$$

Se i due fluidi hanno una differenza in temperatura, si genera una differenza di pressione, e il sistema non va in condizione $T_1 = T_2$.

5.5.2 Modello a due superfluidi ed eccitazioni

Rispetto ad un condensato di Bose-Einstein, in cui a temperatura nulla tutti gli atomi si trovano nello stato condensato, un superfluido ha sempre solo una frazione di particelle nello stato condensato, anche se tutte le particelle partecipano alla supercorrente.

In particolare definiamo come n_s la densità di particelle coinvolte nella supercorrente, n_n la densità di particelle del fluido normale, e n_0 le particelle nello stato fondamentale. Per un gas di Bose-Einstein non interagente abbiamo visto che

$$n_0 = n_s = n \quad T = 0$$

In un superfluido questo non è sempre vero. Rimane però vero che a temperature nulle tutto il fluido partecipa alla supercorrente. Se grafichiamo i valori di n_s e n_n otteniamo la Figura 5.8. L'esponente con cui muore n_s in prossimità della temperatura critica è

$$v \approx 0.67$$

Che è in perfetto accordo con la classe di universalità del modello a XY.

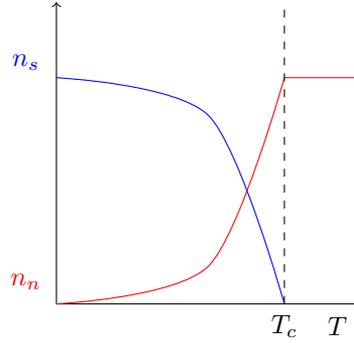


Figura 5.8: Grafico della densità di particelle coinvolte nella supercorrente al variare della temperatura.

5.5.3 Distribuzione del momento

Il modo sperimentalmente più robusto per misurare se un materiale si trova nello stato di superfluido è la misura della distribuzione dei momenti.

La Hamiltoniana del superfluido è estremamente complicata da risolvere:

$$H = - \sum_i \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{ij} V(r_i - r_j)$$

E il potenziale di interazione è del tipo delle sfere dure.

La soluzione completa di questa hamiltoniana è possibile solo con tecniche di Monte Carlo quantistico.

È interessante studiare la distribuzione delle distanze tra gli atomi, caratterizzata dalla matrice densità a singola particella:

$$\rho(r - r') = \langle r | \rho | r' \rangle = \langle r | \psi \rangle \langle \psi | r' \rangle$$

La funzione d'onda del sistema interagente non può essere spezzata:

$$\rho(r - r') = \int d^3 r_2 \cdots d^3 r_n \psi^*(r, r_2, \cdots, r_n) \psi(r', r_2, \cdots, r_n)$$

Possiamo confrontare questa distribuzione con quella di un gas di Bose-Einstein ideale (non interagente):

$$\rho_{BG}(r - r') = \int d^3 r_2 \cdots d^3 r_n \psi^*(r) \psi^*(r_2) \cdots \psi^*(r_n) \psi(r') \psi(r_2) \cdots \psi(r_n)$$

$$\rho_{BG}(r - r') = \psi^*(r) \psi(r')$$

Se ora studiamo cosa avviene a temperatura nulla

$$\rho_{BG}(r - r', T = 0) = \psi_0^*(r) \psi(r') = \frac{1}{V} = \rho_0$$

La matrice densità non dipende da r , ed il sistema è correlato anche a distanza infinita.

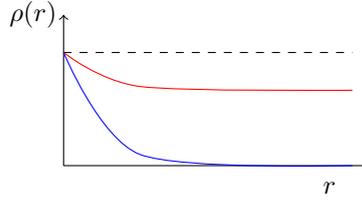


Figura 5.9: In rosso il decadimento dell'elio superfluido per $T > 0$, tratteggiato il Bose Gas per $T = 0$, in blu un fluido tradizionale.

Sia nel caso del gas reale di Bose che nel caso dell'elio superfluido, risolvendo numericamente l'hamiltoniana, si osserva a temperatura finita un plateau al quale la funzione di correlazione si adagia (Figura 5.9)

Possiamo fare un modellino efficace per descrivere la ρ del superfluido (o del Bose-Gas):

$$\rho(r, T) = \rho_0(T) + \Delta\rho(r, T)$$

La distribuzione dei momenti può essere calcolata partendo dalla matrice densità:

$$P(p)d^3p = \frac{Vd^3p}{(2\pi\hbar)^3} \langle \Psi | n_k | \Psi \rangle$$

Dove n_k è l'osservabile che indica la densità di particelle con momento k ($p = \hbar k$).

Siccome la matrice densità rappresenta la densità di particelle, questi osservabili sono collegati da una trasformata di Fourier:

$$\langle \Psi | n_k | \Psi \rangle = \text{Tr} \left[\rho(r - r') \frac{e^{-ik(r-r')}}{V} \right] = \int dr \rho(r) e^{-ikr}$$

Da cui otteniamo

$$\langle n_k \rangle = \int dr \rho_0 e^{-ikr} + \int dr \Delta\rho(r) e^{-ikr}$$

$$\langle n_k \rangle = \rho_0 \delta(k) + f(k)$$

Dove la $f(k)$ è una funzione smooth di k vicino a $k = 0$.

Quindi la presenza di correlazioni a lungo range nei condensati fa insorgere un picco nella distribuzione dei momenti.