

FÍSICA da MATÉRIA CONDENSADA
Mestrado em Engenharia Física Tecnológica
Série 4

2. Considere o Hamiltoniano efectivo ou de campo médio para a supercondutividade:

$$\mathcal{H}_{eff} - \mu N = \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \sum_k (c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \Delta_k + \Delta_k^* c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow})$$

a) Escreva as equações de movimento dos operadores $c_{-k\downarrow}, c_{k\uparrow}^\dagger$, acoplados entre si. Considere o operador $\gamma_{-k\downarrow} = u_k c_{-k\downarrow} + v_k c_{k\uparrow}^\dagger$. Quais as condições que os coeficientes u_k, v_k devem satisfazer para que a equação de movimento deste operador seja

$$i \frac{d\gamma_{-k\downarrow}}{dt} = E_k \gamma_{-k\downarrow}$$

i. e, seja a equação de movimento de um operador de destruição livre? Compare com as equações da teoria variacional de BCS.

b) Proceda de uma forma análoga para os operadores $c_{k\uparrow}, c_{-k\downarrow}^\dagger$, $\gamma_{k\uparrow} = u_k c_{k\uparrow} - v_k c_{-k\downarrow}^\dagger$ e energia E_k .

3. A teoria da supercondutividade pode ser obtida fazendo um tratamento de campo médio. O operador $b_k = c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}$ flutua fracamente em torno da sua média $\langle b_k \rangle = \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle$. Desprezando termos bilineares nestas flutuações obtemos o Hamiltoniano efectivo

$$\begin{aligned} \mathcal{H} - \mu N &= \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'} [c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \langle b_{k'} \rangle + \langle b_k^\dagger \rangle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \\ &\quad - \langle b_k^\dagger \rangle \langle b_{k'} \rangle] = \\ &= \sum_{k,\sigma} (\epsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \sum_k (\Delta_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger + \Delta_k^* c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} + \langle b_k^\dagger \rangle \Delta_k) \end{aligned}$$

tendo definido $\Delta_k = -\sum_{k'} V_{k,k'} \langle b_{k'} \rangle$.

Como este Hamiltoniano é bilinear nos operadores de criação e de destruição pode ser diagonalizado por uma transformação linear destes operadores. Como o estado $k \uparrow$ está acoplado apenas ao estado $-k \downarrow$ basta

trabalhar no sub-espaço destes dois estados apenas. Fazemos então a transformação de Bogoliubov-Valatin

$$\begin{aligned} c_{k\uparrow} &= u_k^* \gamma_{k\uparrow} + v_k \gamma_{-k\downarrow}^\dagger \\ c_{-k\downarrow}^\dagger &= -v_k^* \gamma_{k\uparrow} + u_k \gamma_{-k\downarrow}^\dagger \end{aligned}$$

onde $\gamma_{k\uparrow}, \gamma_{-k\downarrow}$ são operadores fermiônicos e os coeficientes u_k, v_k são escolhidos de modo a diagonalizar o Hamiltoniano.

a) Qual a condição que u_k, v_k devem satisfazer para que tanto os operadores $c_{k\uparrow}, c_{-k\downarrow}$ como os operadores $\gamma_{k\uparrow}, \gamma_{-k\downarrow}$ sejam operadores fermiônicos? Como seria se fossem operadores bosônicos em vez de operadores fermiônicos?

b) Qual a condição que u_k, v_k devem satisfazer para que os termos anômalos desapareçam, i.e. para que os coeficientes de $\gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{-k\downarrow}^\dagger$ e de $\gamma_{k\uparrow} \gamma_{-k\downarrow}$ se anulem?

c) Resolva as equações obtidas nas duas alíneas anteriores e obtenha u_k, v_k .

d) Mostre que o Hamiltoniano diagonalizado toma a forma

$$\mathcal{H} - \mu N = \sum_k E_k (\gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{k\uparrow} + \gamma_{-k\downarrow}^\dagger \gamma_{-k\downarrow}) + \sum_k ((\epsilon_k - \mu) - E_k + \Delta_k^* \langle b_k \rangle)$$

e indique a expressão de E_k . Indique a expressão da energia de condensação da transição para a fase supercondutora.

c) Admitindo que os operadores fermiônicos $\gamma_{k\uparrow}, \gamma_{-k\downarrow}$ são caracterizados por uma distribuição de Fermi à temperatura T , mostre que a auto-consistência da solução obtida, exige, usando as equações de definição de Δ_k e de b_k , que se tenha

$$\begin{aligned} \Delta_k &= - \sum_{k'} V_{k,k'} u_{k'}^* v_{k'} [1 - 2f(E_{k'})] \\ &= - \sum_{k'} V_{k,k'} \Delta_{k'} [1 - 2f(E_{k'})] / 2E_{k'} \end{aligned}$$

para o gap de energia, à temperatura T .

4. Considere os spinores $\psi_k = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$ e $\psi_k^\dagger = \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}^\dagger & c_{-k\downarrow} \end{pmatrix}$. Defina os operadores $T_k^+ = \psi_k^\dagger \tau^+ \psi_k$, $T_k^- = \psi_k^\dagger \tau^- \psi_k$, $T_k^0 = \psi_k^\dagger \frac{\tau^3}{2} \psi_k$, em que $\tau^\pm = \frac{1}{2}(\sigma^1 \pm i\sigma^2)$, sendo τ^i , com $i = 1, 2, 3$, as matrizes de Pauli usuais.

Mostre que o Hamiltoniano reduzido de BCS toma a forma

$$\mathcal{H}_{red} - \mu N = \sum_k (\epsilon_k - \mu) (\psi_k^\dagger \tau^3 \psi_k + 1) + \sum_{k,k'} V_{k,k'} (\psi_k^\dagger \tau^+ \psi_k) (\psi_{k'}^\dagger \tau^- \psi_{k'})$$

donde resulta o Hamiltoniano de campo médio

$$\mathcal{H}_{eff} - \mu N = \sum_k (\epsilon_k - \mu)(2T_k^0 + 1) - \sum_k (T_k^+ \Delta_k + \Delta^* T_k^-)$$

Compare com a teoria de Stoner para o ferromagnetismo no modelo de Hubbard.

Referências:

C. Kittel, Quantum Theory of Solids, cap.8, J. Wiley & Sons.

P. W. Anderson, Phys. Rev. **112**, 1900 (1958).

Y. Nambu, Phys. Rev. **117**, 648 (1960).

5. a) Defina os operadores $T_k^- = b_k = c_{-k}c_k$, $T_k^+ = b_k^\dagger = c_k^\dagger c_{-k}^\dagger$. Calcule $[T_k^+, T_k^-] = 2T_k^0$, e verifique que os operadores T_k^+ , T_k^- , T_k^0 satisfazem uma álgebra de spin $\frac{1}{2}$. Qual o operador que corresponde à identidade?

b) Considere a transformação $U_k = e^{\zeta_k T_k^+ - \zeta_k^* T_k^-}$, em que $\zeta_k = \frac{\theta_k}{2} e^{i\varphi_k}$. Obtenha o seguinte “disentangling theorem”

$$U_k = e^{\zeta_k T_k^+ - \zeta_k^* T_k^-} = e^{\alpha_k T_k^+} (1 + |\alpha_k|^2)^{T_k^0} e^{-\alpha_k^* T_k^-}$$

com $\alpha_k = \tan \frac{\theta_k}{2} e^{i\varphi_k}$.

c) Verifique que o vácuo usual $|0\rangle$ é transformado no estado

$$|\phi_k\rangle = U_k |0\rangle = (u_k + v_k T_k^+) |0\rangle$$

em que $u_k = \frac{1}{\sqrt{1+|\alpha_k|^2}}$, $v_k = \frac{\alpha_k}{\sqrt{1+|\alpha_k|^2}}$.

d) Obtenha os operadores $\gamma_k = U_k c_k U_k^{-1}$, $\gamma_{-k} = U_k c_{-k} U_k^{-1}$. Compare com as expressões da transformação de Bogoliubov-Valatin para a teoria de BCS.

e) Se os operadores T_k^+ , T_k^- , T_k^0 verificassem uma álgebra de spin S geral, este “disentangling theorem” continuaria a ser válido? Dê um argumento justificando a sua validade. Como faria a sua derivação, no caso geral?

6. Considere os operadores definidos por

$$\hat{S}^a = a_\alpha^\dagger S_{\alpha\beta}^a a_\beta$$

(usando a convenção de soma sobre os índices repetidos) em que os operadores a_α^\dagger , a_β são operadores de criação e de destruição bosônicos ou fermiônicos e $S_{\alpha\beta}^a$ são as matrizes da representação S do momentum angular.

a) Use as identidades

$$[AB, CD] = A[B, C]D - [C, A]BD + CA[B, D] - C[D, A]B$$

$$[AB, CD] = A\{B, C\}D - \{C, A\}BD + CA\{B, D\} - C\{D, A\}B$$

ou

$$[AB, CD] = A[B, C]D - AC[D, B] + [A, C]DB - C[D, A]B$$

$$[AB, CD] = A\{B, C\}D - AC\{D, B\} + \{A, C\}DB - C\{D, A\}B$$

para verificar que os operadores \hat{S}^a satisfazem as relações de comutação que caracterizam os operadores de spin.

A representação de Schwinger consiste em usarmos operadores bosônicos e matrizes de Pauli, e a representação de Abrikosov em usarmos operadores fermiônicos e matrizes de spin S .

No caso de as matrizes $S_{\alpha\beta}^a$ serem de spin $\frac{1}{2}$, use a identidade

$$\sigma_{\alpha\beta}^l \sigma_{\mu\nu}^l = 2\delta_{\alpha\nu}\delta_{\mu\beta} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\mu\nu}$$

para exprimir o operador \hat{S}^2 em termos do operador número $N = a_\alpha^\dagger a_\alpha$.

Ao usarmos estas representações o espaço de Hilbert é alargado. Como são representados os $2S + 1$ estados físicos?

b) Considere os spinores $\psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2^\dagger \end{pmatrix}$ e $\psi^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^\dagger & a_2 \end{pmatrix}$ e defina os operadores $\vec{T} = \psi^\dagger \vec{\sigma} \psi$, os quais satisfazem a álgebra de spin $\frac{1}{2}$.

Considere agora os spinores $\varphi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ e $\varphi^\dagger = \begin{pmatrix} a_1^\dagger & a_2^\dagger \end{pmatrix}$ e defina os operadores $\vec{S} = \varphi^\dagger \vec{\sigma} \varphi$, os quais satisfazem também a álgebra de spin $\frac{1}{2}$.

Verifique que os operadores \vec{T} e \vec{S} comutam entre si. Qual a sua acção no espaço dos estados?