cooper pair

电子间通过交换虚声子所产生的超导基态：费米面附近动量相反自旋相反的电子通过吸引相互作用形成束缚电子对状态..

我们将在T=0K下证明 cooper pair 的能量低于2个自由电子，这里费米球内电子用自由电子处理，占据球内所有能级与球外两电子无相互作用。将两电子视为二体问题处理。

Schrödinger equation of two electrons

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla_{r_1}^2}{2m}-\frac{\hbar^2\nabla_{r_2}^2}{2m}+V(\vec r_1-\vec r_2)\right]\Psi(\vec r_1,\vec r_2)=E\,\Psi(\vec r_1,\vec r_2)$$

相对坐标 $\vec r=\vec r_1-\vec r_2$，质心坐标 $\vec R=\frac{1}{2}(\vec r_1+\vec r_2)$，$m^*=2m$，$\mu=m/2$

$$\nabla_{r_1}^2=\frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial R^2}+\frac{\partial^2}{\partial R\,\partial r}+\frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

$$\nabla_{r_2}^2=\frac{1}{4}\frac{\partial^2}{\partial R^2}-\frac{\partial^2}{\partial R\,\partial r}+\frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

方程变为 $\left[-\frac{\hbar^2\nabla_R^2}{2m^*}-\frac{\hbar^2\nabla_r^2}{2\mu}+V(\vec r)\right]\Psi(\vec r,\vec R)=E\,\Psi(\vec r,\vec R)$　　$K^2=\frac{2m^*E_R}{\hbar^2}$

分离变量 $\Psi(\vec r,\vec R)=\phi(\vec R)\psi(\vec r)\Rightarrow\begin{cases}-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla_R^2\phi(\vec R)=E_R\phi(\vec R)\Rightarrow\phi(\vec R)\propto e^{i\vec K\cdot\vec R}\\ \left[-\frac{\hbar^2\nabla_r^2}{2\mu}+V(\vec r)\right]\psi(\vec r)=E_r\psi(\vec r)\quad\text{(relative)}\end{cases}$

$$E_r=E-\frac{\hbar^2K^2}{2m^*}$$

当 $\vec K=0$ 时，质心动量消失即两电子有相反的动量 $E_r=E$（下面我们均写成E）
此外在自旋单态下，$\psi(\vec r)=\psi(-\vec r)$。

下面我们对 relative equation 进行 Flourier 变换得到k空间中的schrödinger 方程

$$\psi(\vec k)=\int d^3r\,\psi(\vec r)e^{-i\vec k\cdot\vec r}\qquad\psi(\vec r)=\sum_k\psi(\vec k)e^{i\vec k\cdot\vec r}$$ 代入 relative 方程

$$\sum_k\left[\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\psi(\vec k)e^{i\vec k\cdot\vec r}+V(\vec r)\psi(\vec k)e^{i\vec k\cdot\vec r}\right]=\sum_k E\,\psi(\vec k)e^{i\vec k\cdot\vec r}$$

左乘 $\psi^*(\vec r)$ 并在全空间积分

$$\int\left[\sum_{kk'}\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\psi^*(\vec k')\psi(\vec k)e^{i\vec r(\vec k-\vec k')}+\sum_{kk'}V(\vec r)\psi^*(\vec k')\psi(\vec k)e^{i\vec r(\vec k-\vec k')}\right]dr^3$$

$$=\int\sum_{kk'}E\,\psi^*(\vec k')\psi(\vec k)e^{i\vec r(\vec k-\vec k')}dr^3$$

$$\sum_{kk'}\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\psi^*(\vec k')\psi(\vec k)\delta(\vec k-\vec k')+\sum_k\sum_{k'}\psi^*(\vec k')\psi(\vec k)\int e^{i(\vec k-\vec k')\cdot\vec r}V(\vec r)\,d\vec r$$

$$=E\sum_k\sum_{k'}\psi^*(\vec k')\psi(\vec k)\delta(\vec k-\vec k')$$

$$\sum_k\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\psi^*(\vec k)\psi(\vec k)+\sum_k\sum_{k'}\psi^*(\vec k')\psi(\vec k)\int e^{i(\vec k-\vec k')\cdot\vec r}V(\vec r)\,d\vec r$$

$$=E\sum_k\psi^*(\vec k)\psi(\vec k)$$

$$\Rightarrow\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\psi(\vec k)+\sum_{k'}\psi^*(\vec k')V_{\vec k,\vec k'}=E\,\psi(\vec k)$$

$$V_{\vec k,\vec k'}=\int V(\vec r)e^{-i(\vec k-\vec k')\cdot\vec r}d\vec r$$

$$\sum_{\vec k'} \psi(\vec k') V_{\vec k,\vec k'} = \left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)\psi(\vec k)$$

上述即$\vec k$空间的Schrödinger方程

下面我们需要对 $V_{\vec k,\vec k'}$ 进行简化：

$\vec k,\vec k'$ 是两个电子的相对波矢，其均处于费米面外通过交换声子$\vec q$改变波矢，

$q \le q_D$（德拜频率），故
$$\begin{cases} k_F<|\vec k|,|\vec k'|<k_F+q_D \\ \varepsilon_F<\varepsilon(\vec k),\varepsilon(\vec k')<\hbar\omega_D+\varepsilon_F \end{cases}$$

又 $k_F \gg q_D$ ($\varepsilon_F\gg\hbar\omega_D$)，则 $\vec k,\vec k'$ 只在很小范围内变化

可将 $V_{\vec k,\vec k'}$ 近似简化为

$$V_{\vec k,\vec k'}=\begin{cases} -V, & k_F<|\vec k|,|\vec k'|<k_F+q_D \\ 0, & \text{else} \end{cases}$$

进一步方程有
$$-V\sum_{\vec k'}\psi(\vec k')=\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)\psi(\vec k)$$
$$-VC=\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)\psi(\vec k)$$
$$\psi(\vec k)=\frac{-VC}{E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}}$$

再求和
$$\sum_k\psi(\vec k)=C=\sum_k\frac{-VC}{E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}}$$
$$1=\sum_k\frac{V}{\frac{\hbar^2k^2}{2m}-E}=\sum_k\frac{V}{2\varepsilon(\vec k)-E} \quad \left(\varepsilon=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)$$

积分代换
$$\sum_{\vec k}\to\int g(\varepsilon)d\varepsilon \Rightarrow 1=\int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F+\hbar\omega_D}\frac{Vg(\varepsilon)}{2\varepsilon-E}d\varepsilon$$

数量级上 $\varepsilon_F\sim1\text{-}10\,eV$, $\hbar\omega_D\sim10^{-2}\,eV$ $\varepsilon_F\gg\hbar\omega_D$, 我们取 $g(\varepsilon)=g(\varepsilon_F)$

$$1=\int_{\varepsilon_F}^{\varepsilon_F+\hbar\omega_D}\frac{Vg(\varepsilon_F)}{2\varepsilon-E}d\varepsilon$$
$$\frac{2}{Vg(\varepsilon_F)}=\ln\frac{2\varepsilon_F+2\hbar\omega_D-E}{2\varepsilon_F-E}$$
$$2\varepsilon_F-E=2\hbar\omega_D\exp\left[-\frac{2}{V_0\rho(\varepsilon_F)}\right]$$

$\Rightarrow E<2\varepsilon_F$ 　可见无论相互作用势 V_0 有多小，其都将形成束缚态 Cooper pair

Cooper pair

考虑费米面以上体系

$$H=\sum_k \varepsilon_k (C_k^+ C_k + C_{-k}^+ C_{-k}) - V\sum_{k,k'>k_F} C_{k'}^+ C_{-k'}^+ C_{-k} C_k$$

① $T=0k$，费米球内电子作自由电子处理，附加电子禁止占据 $k<k_F$

② 完全忽略球内电子散射到球外的情况

③ 只考虑附加电子，作二体散射问题处理

H本征态 $|\psi\rangle=\sum_{k>k_F} a(k)\, C_k^+ C_{-k}^+ |F\rangle$

下面使用变分法确定待定系数 $a(k)$

$$\bar{H} = \langle\psi|H|\psi\rangle = E$$

$$= 2\sum_{k>k_F}\varepsilon_k |a(k)|^2 - V\sum_{k,k'>k_F} a^*(k')\,a(k)$$

后面我们证明一下

引入拉氏乘子 λ

$$\delta \bar{H} - \delta\lambda\langle\psi|\psi\rangle = 0$$

$\rightarrow k'=k+q$

$$\frac{\partial}{\partial a^*(k)}\left\{2\sum_{k>k_F}\varepsilon_k a^*(k)a(k) - V\sum_{k,k'>k_F} a^*(k')a(k) - \lambda\sum_k a^*(k)a(k)\right\} = 0$$

$$2\sum_{k>k_F}\varepsilon_k a(k) - V\sum_{\substack{k,q\\ >k_F}} a(k-q) - \lambda\sum_k a(k)=0$$

$$2\varepsilon_k a(k) - V\sum_{k'>k_F} a(k') - \lambda a(k) = 0$$

$$(2\varepsilon_k - \lambda)\,a(k) = \sum_{k'>k_F} V a(k') \quad \text{----} \; a(k)\text{的本征值方程}$$

我们令 $\sum_{k'>k_F} a(k') = A$

$$a(k) = \frac{A}{2\varepsilon_k-\lambda}$$

$$\sum_{k>k_F} a(k) = A = \sum_{k>k_F}\frac{A}{2\varepsilon_k-\lambda}$$

$$1 = V\sum_{k>k_F}\frac{1}{2\varepsilon_k-\lambda} \quad (0<\varepsilon_k<\hbar\omega_D)$$

$\sum_{k>k_F} \rightarrow \int_0^{\hbar\omega_D} g(\varepsilon)d\varepsilon$: $1 = \left(V\int_0^{\hbar\omega_D}\frac{g(\varepsilon)d\varepsilon}{2\varepsilon_k-\lambda}\right) = V\int_{E_F}^{E_F+\hbar\omega_D}\frac{g(\varepsilon)d\varepsilon}{2\varepsilon_k-\lambda}$

电子波矢 $\vec{k},\vec{k}'\in(k_F,\ k_F+q_D)$

$\varepsilon(k),\ \varepsilon(k')\in(\varepsilon_F,\ \hbar\omega_D+\varepsilon_F)$

$\varepsilon_F \gg \hbar\omega_D$ 其在 k_F 附近能壳 $\hbar\omega_D$ 的很小范围内变化 $\Rightarrow g(\varepsilon)\approx g(\varepsilon_F)$

$$1 = V\int_{E_F}^{E_F+\hbar\omega_D}\frac{g(E_F)\,d\varepsilon}{2\varepsilon_k-\lambda}$$

$$\lambda = 2\varepsilon_F - \frac{2\hbar\omega_D}{\exp[2/g(\varepsilon_F)V]-1}$$

下面我们证明 $\lambda=E$

由 $a(k)$ 的本征值方程

$$(2\varepsilon_k-\lambda)\,a(k) = \sum_{k'>k_F} V a(k')$$

$$\sum_{k>k_F} a^*(k)\left[(2\varepsilon_k-\lambda)a(k)\right] = \sum_{k,k'>k_F} V a^*(k)a(k')$$

$$\sum_{k>k_F} 2\varepsilon_k |a(k)|^2 - V\sum_{k,k'>k_F} a^*(k')a(k) = \lambda = E$$

即 $$E = 2\varepsilon_F - \frac{2\hbar\omega_D}{\exp[2/g(\varepsilon_F)V]-1}$$

弱耦合条件下 $g(\varepsilon_F)V \ll 1$

$$E = 2\varepsilon_F - 2\hbar\omega_D\exp\left[\frac{-2}{g(\varepsilon_F)V}\right] < 2\varepsilon_F$$

电子对基态能量低于 $2\varepsilon_F$，形成束缚态的 Cooper pair

1) 只要电子对间存在有效相互吸引作用，无论 V 多弱都能形成 Cooper pair

2) 电子对能量低于费米面上的一对自由电子。电子将由于形成 Cooper pair 而获取能量，导致费米球不再稳定分布

3) Cooper pair 结合能 $\Delta E = 2\hbar\omega_D\exp\left[\frac{-2}{g(\varepsilon_F)V}\right]$，无法展开为 V 的幂级数，不能用微扰论处理

4) 尺寸（多大空间范围内电子可能成对）

$\Delta x\sim\frac{\hbar}{\Delta p}$ $\quad E=\frac{p^2}{m} \Rightarrow \Delta E\sim\frac{p_F}{m}\Delta p = v_F\Delta p$

$\Delta x\sim\frac{\hbar v_F}{\Delta E}\sim\frac{E_F}{k_F\Delta E}$ $\quad E_F\sim 1\,eV$, $k_F\sim Å^{-1}$ $\quad \Delta E\sim k_B T_c\sim 10^{-4}\,eV$ ($T_c \sim 10K$) $\Rightarrow \Delta x \approx 10^4\,Å$

$v_F=\frac{\hbar k_F}{m}$ 费米速度

BCS约化哈密顿量

$H = H_0 + H_{eff} + H_{coul}$

电子能量 $H_0=\sum_{k\sigma} E_k C^+_{k,\sigma} C_{k,\sigma}$

电子交换虚声子有效互作用 $H_{eff}=\frac{1}{2}\sum_{\substack{q,k_1,k_2\\ \sigma_1,\sigma_2}} V_{k_1,q} C^+_{k_1+q,\sigma_1} C^+_{k_2-q,\sigma_2} C_{k_2,\sigma_2} C_{k_1,\sigma_1}$

$$V_{k_1,q}=|D_q|^2\frac{2\hbar\omega_q}{(E_{k_1+q}-E_{k_1})^2-(\hbar\omega_q)^2} \Rightarrow$$

费米面附近 $|E_{k_1+q}-E_{k_1}|<\hbar\omega_q$ 能壳内
$V_{k_1,q}<0$，H_{eff}为吸引互作用
能壳外 $V_{k_1,q}>0$ 为排斥互作用
考虑 $(\omega_q)_{max}\approx\omega_D$ 附近能壳
$V_{k_1,q}$中厚度随ω_q变化的吸引区 近似用费米面附近厚为$2\hbar\omega_D$的能壳表示 (近似).

近似①

$$V_{k,q}=\begin{cases}-V, & |E_{k+q}-E_k|<\hbar\omega_q\\ 0, & \text{else}\end{cases}$$

这里解释一下为何考虑 $\omega_q\approx\omega_D$ 附近的能壳(而不是别处)

首先是电子波矢 $\vec{k}_1,\vec{k}_2$ 形成 cooper pair 需满足的条件 (figure.1)

动量守恒: $\begin{cases}\vec{k}_1+\vec{k}_2=\vec{K}=\vec{k}_1'+\vec{k}_2'\\ (\hbar\omega_q)_{max}=\hbar\omega_D\end{cases}$

$\varepsilon=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$　$d\varepsilon=\frac{\hbar^2k}{m}dk$ 即 $\Delta k=\frac{m}{\hbar^2k}\Delta\varepsilon$

极限条件下 $|\Delta\varepsilon|=\hbar\omega_D \Rightarrow |(\Delta k)_{max}=\frac{m\omega_D}{\hbar k_F}$

其次.

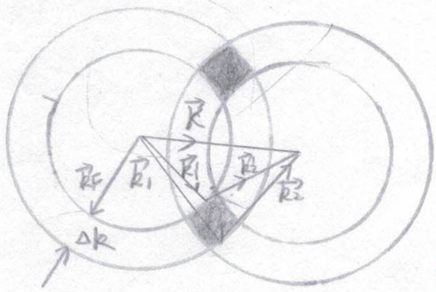
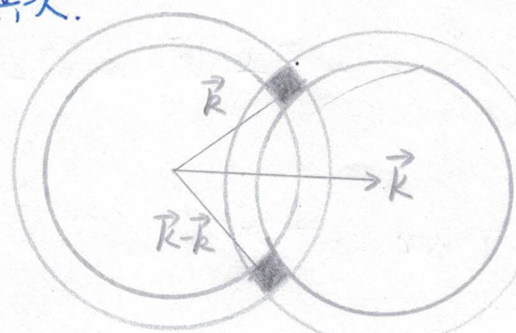


figure.1



2.

因此 $\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_1',\vec{k}_2'$ 只有落在交叠区才能形成 cooper pair

对于不同$\vec{K}$具有吸引互作用的电子对数目不同 由阴影区决定。
当 $\vec{K}=0$ 时 阴影区最大 即为 $\Delta\varepsilon\approx\hbar\omega_D$ 的球壳
其大于任何一个$\vec{K}\neq0$对的相体积.
我们将会略去任何$\vec{K}\neq0$的项.

库仑势 $H_{coul}=\frac{1}{2}\sum_{\substack{q,k_1,k_2\\ \sigma_1,\sigma_2}}\frac{4\pi e^2}{q^2+\lambda^2}C^+_{k_1+q,\sigma_1}C^+_{k_2-q,\sigma_2}C_{k_2,\sigma_2}C_{k_1,\sigma_1}$

近似②：略去 $\hbar\omega_D$ 能壳外的 H_{coul} （→后页 Appendix）

能壳内净吸引互作用（$V_{k_1,q}+\frac{4\pi e^2}{q^2+\lambda^2}$）由常数近似代替

$$H_{eff}+H_{coul}\rightarrow H_{eff}=-\frac{V}{2}\sum_{\substack{q,k_1,k_2\\ \sigma_1,\sigma_2}}C^+_{k_1+q,\sigma_1}C^+_{k_2-q,\sigma_2}C_{k_2,\sigma_2}C_{k_1,\sigma_1}$$

令 $\vec{K}=\vec{k}_1+\vec{k}_2$： $H_{eff}=-\frac{V}{2}\sum_{\substack{q,k_1,k_2\\ \sigma_1,\sigma_2}}C^+_{k_1+q,\sigma_1}C^+_{K-k_1-q,\sigma_2}C_{K-k_1,\sigma_2}C_{k_1,\sigma_1}$

令 $\vec{k'}=\vec{k}+\vec{q}$，$\vec{k}=\vec{k}_1$，$\sigma_1=\sigma$，$\sigma_2=\sigma'$：

$$H_{eff}=-\frac{V}{2}\sum_{k,k_0,k',\sigma,\sigma'}C^+_{k',\sigma}C^+_{K-k',\sigma'}C_{K-k,\sigma'}C_{k,\sigma}=\sum_K H_K$$

$$H_K=-\frac{V}{2}\sum_{k,k',\sigma,\sigma'}C^+_{k',\sigma}C^+_{K-k',\sigma'}C_{K-k,\sigma'}C_{k,\sigma}$$

H_K 只对系统中总波矢为 $\vec{K}$ 的电子对作用

由 figure.2 我们只取 $\vec{K}=0$，另外考虑泡利不相容原理取 $\sigma'=-\sigma$

$$H_K\rightarrow H'=-\frac{V}{2}\sum_{k,k',\sigma}C^+_{k',\sigma}C^+_{-k',-\sigma}C_{-k,-\sigma}C_{k,\sigma}$$

综上 $\hat{H}=H_0+H'=\sum_{k,\sigma}E_kC^+_{k,\sigma}C_{k,\sigma}-\frac{V}{2}\sum_{k,k',\sigma}C^+_{k',\sigma}C^+_{-k',\sigma}C_{-k,-\sigma}C_{k,\sigma}$

$$\hat{H}=\sum_k E_k(C^+_{k\uparrow}C_{k\uparrow}+C^+_{k\downarrow}C_{k\downarrow})$$

$$-\frac{V}{2}\sum_{k,k'}(C^+_{k'\uparrow}C^+_{-k'\downarrow}C_{-k\downarrow}C_{k\uparrow}+C^+_{k'\downarrow}C^+_{-k'\uparrow}C_{-k\uparrow}C_{k\downarrow})$$

上式右边最后一项 $(\vec{k},\vec{k'})\rightarrow(-\vec{k},-\vec{k'})$，又 $E_k=E_{-k}$

$$\sum_{k,k'}C^+_{-k'\downarrow}C^+_{k'\uparrow}C_{k\uparrow}C_{k\downarrow}$$

$$\hat{H}=\sum_k E_k(C^+_{k\uparrow}C_{k\uparrow}+C^+_{-k\downarrow}C_{-k\downarrow})-V\sum_{k,k'}C^+_{k'\uparrow}C^+_{-k'\downarrow}C_{-k\downarrow}C_{k\downarrow}$$

取 $(\vec{k},\uparrow)\equiv k$，$(-\vec{k},\downarrow)\equiv -k$

$$\hat{H}=\sum_k E_k(C^+_kC_k+C^+_kC_k)-V\sum_{k,k'}C^+_{k'}C^+_{-k'}C_{-k}C_k$$

当考虑费米面以上时 $\hat{H}=\sum_k \varepsilon_k(C^+_kC_k+C^+_{-k}C_{-k})-V\sum_{k,k'>k_F}C^+_{k'}C^+_{-k'}C_{-k}C_k$

$\varepsilon_k=E_k-E_F$ $\quad$ V 仅在 $|\varepsilon_k|<\hbar\omega_D$ 不为0

Many Cooper pairs : BCS state

有效哈密顿量

$$H=\sum_k \varepsilon_k(C_k^+C_k+C_{-k}^+C_{-k})-V\sum_{k,k'>k_F}C_{k'}^+C_{-k'}^+C_{-k}C_k$$

超导基态变分试探函数

$$|0\rangle=\prod_k(U_k+V_kC_k^+C_{-k}^+)|Vac\rangle$$

U_k^2 对状态未被占据的概率

V_k^2 对状态被占据的概率

为求解 H 的本征矢与本征值，我们将引入平均场近似以及玻戈留变换（当然对于超导基态的求解我们也可以使用BCS变分法）

1) 本征值

平均场近似（Cooper pair 组成超导基态）：（$|0\rangle$ 未知）

$$\langle C_k^+C_{-k}^+C_{-k}C_k\rangle\approx\underbrace{\langle C_k^+C_{-k}^+\rangle}_{\text{对应于一个 Cooper pair}}C_{-k}C_k+\langle C_{-k}C_k\rangle C_k^+C_{-k}^+-\langle C_k^+C_{-k}^+\rangle\langle C_{-k}C_k\rangle$$

另外我们定义 gap function：$\Delta=\sum_k\langle C_{-k}C_k\rangle$ （$\Delta=\Delta_k=\sum_{k'}\langle C_{-k'}C_{k'}\rangle$）↗ Δ 与 k 无关 解释见后页）

$$H=\sum_k\varepsilon_k(C_k^+C_k+C_{-k}^+C_{-k})-\sum_k\Delta(C_k^+C_{-k}^++C_{-k}C_k)+\frac{\Delta^2}{V}\longrightarrow \text{严格可解 model}$$

Bogoliubov transformation：对角化上述 model

$$\left.\begin{aligned}\gamma_k=U_kC_k-V_kC_{-k}^+,&\quad \gamma_k^+=U_kC_k^+-V_kC_{-k}\\ \gamma_{-k}=U_kC_{-k}+V_kC_k^+,&\quad \gamma_{-k}^+=U_kC_{-k}^++V_kC_k\end{aligned}\right\}$$

对易关系：（满足反对易关系）

$$\{\gamma_k,\gamma_{k'}^+\}=U_kU_{k'}\{C_k,C_{k'}^+\}+V_kV_{k'}\{C_{-k}^+,C_{-k'}\}=\delta_{kk'}(U_k^2+V_k^2)=\delta_{kk'}$$

$$\{\gamma_k,\gamma_{-k'}\}=U_kV_{k'}\{C_k,C_{k'}^+\}-V_kU_{k'}\{C_{-k}^+,C_{-k'}\}=\delta_{kk'}(U_kV_k-U_kV_k)=0$$

$$\left.\begin{aligned}C_k=U_k\gamma_k+V_k\gamma_{-k}^+,&\quad C_k^+=U_k\gamma_k^++V_k\gamma_{-k}\\ C_{-k}=U_k\gamma_{-k}-V_k\gamma_k^+,&\quad C_{-k}^+=U_k\gamma_{-k}^+-V_k\gamma_k\end{aligned}\right\}$$

代入 H 中

6

$$\varepsilon_k (C_k^+ C_k + C_{-k}^+ C_{-k})$$

$$= \varepsilon_k [u_k^2 \gamma_k^+ \gamma_k + u_k v_k \gamma_k^+ \gamma_{-k}^+ + v_k u_k \gamma_{-k} \gamma_k + v_k^2 \underbrace{\gamma_{-k} \gamma_{-k}^+}_{1-\gamma_{-k}^+\gamma_{-k}}$$

$$+ u_k^2 \gamma_{-k}^+ \gamma_{-k} - u_k v_k \gamma_{-k}^+ \gamma_k^+ - v_k u_k \gamma_k \gamma_{-k} + v_k^2 \underbrace{\gamma_k \gamma_k^+}_{1-\gamma_k^+\gamma_k}]$$

$$= \varepsilon_k [2(u_k^2 - v_k^2)(\gamma_k^+ \gamma_k + \gamma_{-k}^+ \gamma_{-k}) + 2v_k^2 + 2u_k v_k (\gamma_k^+ \gamma_{-k}^+ + \gamma_{-k} \gamma_k)]$$

$$\Delta (C_k^+ C_{-k}^+ + C_{-k} C_k)$$

$$= \Delta [u_k^2 \gamma_k^+ \gamma_{-k}^+ - u_k v_k \underbrace{\gamma_k^+ \gamma_k}_{} + v_k u_k \overbrace{\gamma_{-k} \gamma_{-k}^+}^{2vu(1-\gamma_{-k}^+\gamma_{-k})} - v_k^2 \gamma_{-k} \gamma_k$$

$$+ u_k^2 \gamma_{-k} \gamma_k + u_k v_k \cancel{\gamma_{-k} \gamma_{-k}^+} - v_k u_k \cancel{\gamma_k^+ \gamma_k} - v_k^2 \gamma_k^+ \gamma_{-k}^+]$$

$$= \Delta [(u_k^2 - v_k^2)(\gamma_k^+ \gamma_{-k}^+ + \gamma_{-k} \gamma_k) - 2u_k v_k (\gamma_k^+ \gamma_k + \gamma_{-k}^+ \gamma_{-k}) + 2uv]$$

$$H = \sum_k \{ [\varepsilon_k (u_k^2 - v_k^2) + 2\Delta u_k v_k] (\gamma_k^+ \gamma_k + \gamma_{-k}^+ \gamma_{-k}) +$$

$$[2\varepsilon_k u_k v_k - \Delta (u_k^2 - v_k^2)] (\gamma_k^+ \gamma_{-k}^+ + \gamma_{-k} \gamma_k) \}$$

$$+ \sum_k [2\varepsilon_k v_k^2 - 2u_k v_k \Delta] + \frac{\Delta^2}{V}$$

要求非对角项$(\gamma_k^+ \gamma_{-k}^+ + \gamma_{-k} \gamma_k)$系数为0

$$\Delta (u_k^2 - v_k^2) = 2\varepsilon_k u_k v_k \qquad + \quad (u_k^2 + v_k^2 = 1)$$

$$u_k^4 - u_k^2 + \frac{\Delta^2}{4\xi_k^2} = 0 \qquad \xi_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2} \qquad \varepsilon_k = E_k - E_F$$

$u_k^2 = \frac{1}{2}(1 \pm \frac{\varepsilon_k}{\xi_k})$，正负号的选择 参考正常态 $\Delta = 0$ 的情况

取 $u_k^2 = \frac{1}{2}(1 + \frac{\varepsilon_k}{\xi_k}) \quad v_k^2 = \frac{1}{2}(1 - \frac{\varepsilon_k}{\xi_k})$

当 $\Delta = 0$ 时 $\xi_k = |\varepsilon_k|$

$$u_k^2 = \frac{1}{2}(1 + \frac{\varepsilon_k}{|\varepsilon_k|}) = \begin{cases} 1 & (k > k_F) \\ 0 & (k < k_F) \end{cases} \qquad \gamma_k^+ = \begin{cases} C_k^+ & (k > k_F) \text{ 球外产生电子} \\ C_{-k} & (k < k_F) \end{cases}$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2}(1 - \frac{\varepsilon_k}{|\varepsilon_k|}) = \begin{cases} 0 & (k > k_F) \\ 1 & (k < k_F) \end{cases} \qquad \gamma_k = \begin{cases} C_k & (k > k_F) \text{ 球外湮灭电子} \\ C_{-k}^+ & (k < k_F) \end{cases}$$

完全等价于自由电子气中费米球的电子激发产生空穴的问题.

当$\Delta\neq0$时

u_k与v_k在球外同时出现，γ_k代表电子与空穴的混合

在物理上理解为有效势破坏了费米球分布，以致$T=0K$时

$k<k_F$区可产生空穴，$k>k_F$区也可产生空穴

对角化后

$$\hat{H}=\sum_k\left[\varepsilon_k(u_k^2-v_k^2)+2\Delta u_k v_k\right](\gamma_k^+\gamma_k+\gamma_{-k}^+\gamma_{-k})$$

$$+2\varepsilon_k v_k^2-2u_k v_k\Delta]+\frac{\Delta^2}{V}$$

又 $\varepsilon_k(u_k^2-v_k^2)+2\Delta u_k v_k=\xi_k=\sqrt{\varepsilon_k^2+\Delta^2}$

$\varepsilon_k=\varepsilon_k-E_F$

则 $H=\sum_k\sqrt{\varepsilon_k^2+\Delta^2}\,(\gamma_k^+\gamma_k+\gamma_{-k}^+\gamma_{-k})+E_s(0)$

$$E_s(0)=2\sum_k\varepsilon_k v_k^2-2\Delta\sum_k u_k v_k+\frac{\Delta^2}{V}$$

当$k\to k_F$时，$\xi_k=\Delta$，此时由H可知 从费米面激发一个准粒子至少需要Δ能量

2) 基态波函数$|0\rangle$推导

由上述种种可知，在Bogoliubon transformation下，$\gamma_k^+|\gamma_k$变成了超导态的电子/空穴产生算符

$$\gamma_k|0\rangle=0$$

又 $\gamma_k=u_k c_k-v_k c_{-k}^+$

则 $u_k c_k|0\rangle=v_k c_{-k}^+|0\rangle$ （基态条件式）

我们现在将BCS基态写成cooper pairs的任一组合

$$|0\rangle=N\prod_q e^{\alpha_q c_q^+ c_{-q}^+}|Vac\rangle$$

N为归一化常数

α_q待定

由$\{c_{k_1},c_{k_2}^+\}=0$可得$c_{k_1}c_{k_2}^+\equiv0$ 只有当$k_1=k_2$时才起作用

故对于 $c_k|0\rangle=Nc_k\prod_q e^{\alpha_q c_q^+ c_{-q}^+}|Vac\rangle$

我们只需关注$k=q$的展开项

$$c_k e^{\gamma_k c_k^+ c_{-k}^+}|Vac\rangle = c_k e^{\theta_k}|Vac\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{c_k\theta_k^n}{n!}|Vac\rangle$$

$$[c_k,\theta_k] = \gamma_k[\{c_k,c_k^+\}c_{-k}^+ - c_k^+\{c_k,c_{-k}^+\}] = \gamma_k c_{-k}^+$$

$$c_k\theta_k|Vac\rangle = (\gamma_k c_{-k}^+ + \theta_k c_k)|Vac\rangle = \gamma_k c_{-k}^+|Vac\rangle$$

$$c_k\theta_k^2|Vac\rangle = ([c_k\theta_k,\theta_k] + \theta_k c_k\theta_k)\cancel{|0\rangle}|Vac\rangle$$

$$= \theta_k([c_k,\theta_k] + c_k\theta_k)|0\rangle = 2\theta_k\gamma_k c_{-k}^+|0\rangle$$

$$c_k\theta_k^n|Vac\rangle = n\theta_k^{n-1}\gamma_k c_{-k}^+\cancel{|0\rangle}|Vac\rangle$$

$$c_k e^{\gamma_k c_k^+ c_{-k}^+}|Vac\rangle = \gamma_k\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\theta_k^{n-1}}{(n-1)!}c_{-k}^+|Vac\rangle$$

$$= \gamma_k c_{-k}^+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\theta_k^n}{n!}|Vac\rangle \qquad [c_{-k}^+,\theta_k]=0$$

$$= \gamma_k c_{-k}^+ e^{\gamma_k c_k^+ c_{-k}^+}|Vac\rangle$$

代入基态条件式

$$u_k c_k|0\rangle = u_k N c_k e^{\gamma_k c_k^+ c_{-k}^+}|Vac\rangle$$

$$= u_k N\gamma_k c_{-k}^+ e^{\gamma_k c_k^+ c_{-k}^+}|Vac\rangle$$

$$= \gamma_k u_k \cancel{N} c_{-k}^+ N\prod_q e^{\gamma_q c_q^+ c_{-q}^+}|Vac\rangle$$

$$= u_k\gamma_k c_{-k}^+|0\rangle$$

$$= v_k c_{-k}^+|0\rangle$$

$$\gamma_k = \frac{v_k}{u_k}$$

则 $|0\rangle = N\prod_k e^{\frac{v_k}{u_k}c_k^+ c_{-k}^+}|Vac\rangle$

$$= N\prod_k\left(1+\frac{v_k}{u_k}c_k^+ c_{-k}^+\right)|Vac\rangle$$

$$\Rightarrow |0\rangle = \prod_k(u_k + v_k c_k^+ c_{-k}^+)|Vac\rangle$$

对上式归一化：

$$\langle 0|\left(1+\frac{v_k^*}{u_k^*}c_{-k}c_k\right)\left(1+\frac{v_k}{u_k}c_k^+ c_{-k}^+\right)|0\rangle$$

$$= \langle 0|1+\frac{|v_k|^2}{|u_k|^2}c_{-k}c_k c_k^+ c_{-k}^+|0\rangle$$

$$= \langle 0|1+\frac{|v_k|^2}{|u_k|^2}|0\rangle \qquad N=\prod_k u_k$$

上述我们导出

$$|0\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_k^+ c_{-k})|Vac\rangle$$

超导基态下电子占据数算符 $c_k^+ c_k$ 求平均 (T=0K)

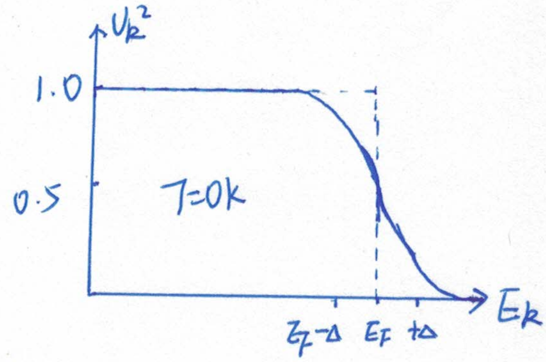
$$n = \langle 0| c_k^+ c_k |0\rangle$$

$$= \langle 0|(u_k \gamma_k^+ + v_k \gamma_{-k})(u_k\gamma_k + v_k \gamma_{-k}^+)|0\rangle$$

$$= v_k^2 \langle 0|\gamma_{-k}\gamma_{-k}^+|0\rangle$$

$$= v_k^2 = \left(1-\frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_k^2+\Delta^2}}\right)/2$$

$$= \frac{1}{2}\left(1- \frac{\varepsilon_k - E_F}{\sqrt{(\varepsilon_k-E_F)^2+\Delta^2}}\right)$$



超导基态下且在T=0K时电子的分布与有限温度的费米分布相似。

即在T=0K时，由于Cooper pair的形成导致了费米面的模糊化

3) gap function (T=0K)

$$\Delta = V\sum_k \langle c_{-k} c_k\rangle$$

$$= V\sum_k u_k v_k$$

$$= \frac{V}{2}\sum_k \frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon_k^2+\Delta^2}}$$

$$1 = \frac{V}{2} \sum_k \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_k^2+\Delta^2}}$$

$\sum_k \to \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} g(\varepsilon)\,d\varepsilon$ $\quad 1=\frac{V}{2} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} g(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2}}$ $\quad \Delta \approx 2\hbar\omega_D \exp\left[\frac{-2}{Vg(E_F)}\right]$

这里说明一下为何是对 $\int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D}$，而在 Cooper pair 中为 $\int_0^{\hbar\omega_D}$

在一对 Cooper pair 中，考虑费米面以上体系由体系哈密顿量可知

$$H = \sum_k \varepsilon_k (c_k^+ c_k + c_{-k}^+ c_{-k}) - V\sum_{k,k'>k_F} c_{k'}^+ c_{-k'}^+ c_{-k} c_k$$

在 many cooper pairs 体系中，我们从BCS约化哈密顿量出发

$$H = \sum_k \varepsilon_k(c_k^+c_k + c_{-k}^+c_{-k}) - V\sum_{k,k'} c_{k'}^+ c_{-k'}^+ c_{-k}c_k$$

(4) 凝聚能

在(1)中 $E_s(0) = 2\sum_k \varepsilon_k v_k^2 - 2\Delta\sum_k u_k v_k + \frac{\Delta^2}{V}$

基态能

$$= 2\sum_k \varepsilon_k \frac{1}{2}\left(1-\frac{\varepsilon_k}{\xi_k}\right) - 2\Delta\sum_k \frac{1}{2}\frac{\Delta}{\xi_k} + \frac{\Delta^2}{2}\sum_k \frac{1}{\xi_k}$$

$$= \sum_k \varepsilon_k - \sum_k \frac{\varepsilon_k^2}{\xi_k} - \frac{1}{2}\Delta^2\sum_k \frac{1}{\xi_k}$$

$$= \sum_k \left(\varepsilon_k - \frac{2\varepsilon_k^2+\Delta^2}{2\xi_k}\right)$$

正常态费米球分布能量 $E_n(0) = \sum_{k<k_F} 2\varepsilon_k$

凝聚能 $E_s(0) - E_n(0)$

$$= \sum_{k>k_F}\left(\varepsilon_k - \frac{2\varepsilon_k^2+\Delta^2}{2\xi_k}\right) + \sum_{k<k_F}\left(\varepsilon_k - \frac{2\varepsilon_k^2+\Delta^2}{2\xi_k}\right) - \sum_{k<k_F} 2\varepsilon_k$$

$$= 2\sum_{k>k_F}\left(\varepsilon_k - \frac{2\varepsilon_k^2+\Delta^2}{2\xi_k}\right)$$

$$= 2g(\varepsilon_F)\int_0^{\hbar\omega_D} \varepsilon - \frac{2\varepsilon^2+\Delta^2}{2\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2}}\, d\varepsilon$$

$$= g(\varepsilon_F)(\hbar\omega_D)^2\left[1-\sqrt{1+\left(\frac{\Delta}{\hbar\omega_D}\right)^2}\right]$$

$$\approx -\frac{1}{2}g(\varepsilon_F)\Delta^2 < 0$$

即超导基态能量低于正常态能量

(5) 元激发

由BCS对角化哈密顿量

$$H = E_s + \sum_k \xi_k(\gamma_k^+\gamma_k + \gamma_{-k}^+\gamma_{-k})$$

对于单个准粒子

激发态 $|k\rangle = \gamma_k^+|0\rangle$ …[激发了 k "电子" 而不是 -k "电子" 一定要写成 $|1_k\rangle$ 而不是 $|1\rangle$]

元激发能量 $\langle k|H|k\rangle - \langle 0|H|0\rangle$

$$= \frac{E_s + \sum_k \xi_k}{N} - \frac{E_s}{N}$$ N为总粒子数.

$$= \xi_k = \sqrt{\varepsilon_k^2+\Delta^2}$$

证明:

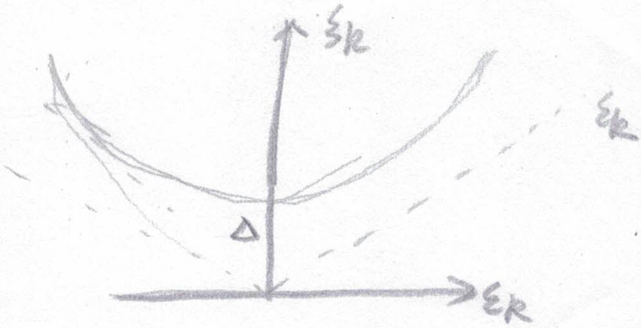
$\langle 1_k|H|1_k\rangle$

$= \sum_k \xi_k \langle 1_k|\gamma_k^+\gamma_k + \gamma_{-k}^+\gamma_{-k}|1_k\rangle$ 不作用

$= \sum_k \xi_k \langle 1_k|\gamma_k^+\gamma_k|1_k\rangle$

$= \sum_k \xi_k \langle 0|0\rangle = \sum_k \xi_k$

$\xi_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}$ 如图



$\varepsilon_k = E_k - E_F$ 是从费米面算起的自由电能量

在费米面上 $\varepsilon_k = 0$，$\xi_k = \Delta$，激发一个准粒子所需的能量为 Δ

同样减少一个准粒子也需 Δ

考虑系统总粒子数守恒，需要在激发一个准粒子("电子型")时，减少一个准粒子("空穴型")，即超导准粒子总是成对激发的

$$\text{激发态 } |\text{对}\rangle = \gamma_k^+ \gamma_{-k}^+ |0\rangle$$

$$\langle\text{对}|H|\text{对}\rangle - \langle 0|H|0\rangle$$

$$= \sum_{k'} \xi_{k'} \langle 0| \gamma_{-k} \gamma_k (\gamma_{k'}^+ \gamma_{k'} + \gamma_{-k'}^+ \gamma_{-k'}) \gamma_k^+ \gamma_{-k}^+ |0\rangle$$

$|\text{对}\rangle = \gamma_k^+ \gamma_{-k}^+ |0\rangle$: ~~...~~

$\gamma_{k'}^+ \gamma_{k'} |\text{对}\rangle$ $(k'=k)$: ~~...~~ 湮灭又产生

$= |\text{对}\rangle$

则 $\langle\text{对}|H|\text{对}\rangle - \langle 0|H|0\rangle$

$$= 2\xi_k = 2\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2}$$

在费米面上激发能最小为 2Δ

6) 超电流

对每一对 Cooper pair $(\vec{k}, -\vec{k})$，当外场作用使费米球移动 $\delta\vec{k}$

相应 Cooper pair $(\vec{k} + \delta\vec{k}, -\vec{k} + \delta\vec{k})$

总动量 $\hbar(2\delta\vec{k})$，质心速度 $\frac{\hbar\delta\vec{k}}{m}$

Cooper pair 运动的电流密度

$$j_s = \frac{n}{2}(-2e)\frac{\hbar\delta\vec{k}}{m} = -\frac{ne\hbar\delta\vec{k}}{m}$$

撤去外场，超导体仍保持上述组态，

$\vec{j}_s$ 不衰减 $\Rightarrow$ Cooper pair 对所载电流是无阻电流

$\vec{j}_s$ 存在上限，这里我们推导一番：

费米球 $\delta\vec{k}$ 的位移引起动能增加

$$\delta\varepsilon = \frac{n}{2}\frac{1}{2}2m\left(\frac{\hbar\delta\vec{k}}{m}\right)^2 = \frac{n\hbar^2(\delta\vec{k})^2}{2m}$$

为保持超导相的稳定，必须要求

$\delta\varepsilon$ 小于凝聚能

$$\delta\varepsilon < \frac{1}{2}g(E_F)\Delta^2 \Rightarrow |\delta k| \text{ 的临界值 } \frac{m\Delta}{\hbar^2 k_F} \qquad g(E_F)=\frac{3n}{4E_F}$$

$$\text{故 } (j_s)_{上限} = \frac{ne\hbar}{m}|\delta\vec{k}_c| \approx \frac{ne\Delta}{\hbar k_F}$$

另外持续电流的存在要求

$$\delta k < \frac{m\Delta}{\hbar^2 k_F}$$

$$\Rightarrow j_s = \frac{ne\hbar}{m}\delta k < \frac{ne\Delta}{\hbar k_F}$$

有限温度情况

$T>0K$ 时 存在准粒子的热激发 $\langle \gamma_k^+ \gamma_k \rangle_T$

$$\Delta(T) = V\sum_k \langle C_k C_k \rangle_T$$

$$= V\sum_k \langle (u_k \gamma_{-k} - v_k \gamma_k^+)(u_k \gamma_k + v_k \gamma_{-k}^+) \rangle_T$$

$$= V\sum_k \langle u_k v_k (\gamma_{-k}\gamma_{-k}^+ - \gamma_k^+ \gamma_k) \rangle_T$$

$$= V\sum_k u_k v_k (1 - \langle \gamma_{-k}^+ \gamma_{-k} \rangle_T - \langle \gamma_k^+ \gamma_k \rangle_T)$$

满足费米分布

$$\langle \gamma_{-k}^+ \gamma_{-k} \rangle_T = \langle \gamma_k^+ \gamma_k \rangle_T = \frac{1}{e^{\beta \xi_k}+1}$$

$$\xi_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2(T)}$$

$$\Delta(T) = V\sum_k u_k v_k \left(1 - \frac{2}{e^{\beta\xi_k}+1}\right) = V\sum_k u_k v_k \frac{e^{\beta\xi_k}-1}{e^{\beta\xi_k}+1}$$

$$u_k v_k = \frac{\Delta(T)}{2\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta^2(T)}}$$

$$\Delta(T) = V\sum_k \frac{\Delta(T)}{2\sqrt{\varepsilon_k^2+\Delta^2(T)}} \frac{e^{\beta\xi_k}-1}{e^{\beta\xi_k}+1}$$

$$1 = V\sum_k \frac{\tanh(\frac{1}{2}\beta\xi_k)}{2\sqrt{\varepsilon_k^2+\Delta^2(T)}}$$

T_c 的确定

由过去的推导可知 当 $\Delta=0$ 时 $\xi_k \Rightarrow |\varepsilon_k|$，超导无激发 → 正常态

我们试图确定 T_c，$\Delta(T_c)=0$，即转变温度

T_c 时
$$1 = V\sum_k \frac{\tanh(\frac{1}{2}\beta_c \varepsilon_k)}{2\varepsilon_k}$$

$$1 = V\int_0^{\hbar\omega_D} \frac{g(E_F)\tanh(\frac{1}{2}\beta_c\varepsilon_k)}{\varepsilon_k} d\varepsilon$$

$$1 = V\int_0^{\frac{1}{2}\beta_c\hbar\omega_D} \frac{g(E_F)\tanh x}{x} dx$$

$$1 = Vg(E_F)\left\{ \ln x \tanh x \Big|_0^{\frac{1}{2}\beta_c\hbar\omega_D} - \int_0^{\frac{1}{2}\beta_c\hbar\omega_D} dx \ln x\, \mathrm{sech}^2 x \right\}$$

由于 $\hbar\omega_D >> k_BT$

我们将第二项积分上限改为 $+\infty$

$$\int_0^\infty \ln x \,\mathrm{sech}^2 x \, dx = -\ln\frac{4e^\gamma}{\pi}$$

$$1 = g(E_F)V\ln\left[\left(\frac{2e^\gamma}{\pi}\right)\left(\frac{\hbar\omega_D}{k_BT_c}\right)\right]$$

$$k_BT_c = \frac{2e^\gamma}{\pi}\hbar\omega_D \exp\left[-\frac{1}{g(E_F)V}\right]$$

$$\approx 1.13\hbar\omega_D \exp\left[-\frac{1}{g(E_F)V}\right]$$

同位素效应

$\omega_D \sim M^{-1/2}$

$\Rightarrow T_c M^{\frac{1}{2}}$ = 常数 的同位素效应公式

表明超导与晶格振动有关

27

$\Delta(T)$ 的推导

由 $\Delta(T) = V\sum_k \frac{\Delta(T)}{2\sqrt{\xi_k^2+\Delta^2(T)}}\frac{e^{\beta\xi_k}-1}{e^{\beta\xi_k}+1}$ 得

$$1 = \frac{V}{2}\sum_k \frac{1}{\sqrt{\xi_k^2+\Delta^2(T)}} - V\sum_k \frac{1}{\sqrt{\xi_k^2+\Delta^2(T)}} \times \frac{1}{e^{\beta\xi_k}+1} \quad \cdots\cdots ②$$

当 $T\to 0$ 时 上式第二项 $(\beta=\frac{1}{k_BT}) \to 0$

$$1 = \frac{V}{2}\sum_k \frac{1}{\sqrt{\xi_k^2+\Delta^2(0)}} = g(E_F)V\ln\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta(0)}$$ 与过去所求一致.

由此我们将 $\frac{V}{2}\sum_k \frac{1}{\sqrt{\xi_k^2+\Delta^2(T)}}$ 写为 $g(E_F)V\ln\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta(T)}$

对②式有 (T时)

$$g(E_F)V\ln\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta(0)} = g(E_F)V\ln\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta(T)} - 2V\int_0^{\hbar\omega_D}\frac{g(E_F)}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2(T)}}\frac{d\varepsilon}{\exp[\beta\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2}]+1}$$

$$\ln\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} = -2\int_0^{\hbar\omega_D/k_BT}\frac{dx}{\sqrt{x^2+\frac{\Delta^2(T)}{(k_BT)^2}}}\cdot\frac{1}{\left[\exp\sqrt{x^2+\left(\frac{\Delta(T)}{k_BT}\right)^2}\right]+1}$$

$$= -2\int_0^\infty dx\,\frac{1}{\sqrt{x^2+\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right)^2}\left(\exp\sqrt{x^2+\left(\frac{\Delta(T)}{k_BT}\right)^2}+1\right)}$$

数值结果有