

Κεφάλαιο 14

Η μικροσκοπική θεωρία BCS

Σε χαμηλές θερμοκρασίες, τα μεταλλικά συστήματα εμφανίζουν συχνά το φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας ως συνέπεια της ύπαρξης μιας ελκτικής ενεργού αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου. Στους συνήθεις υπεραγωγούς η εν λόγω αλληλεπίδραση αποτελεί τη συνισταμένη δύο αντιτιθέμενων όρων: (α) της θωρακισμένης και επομένως βραχείας εμβέλειας απωστικής αλληλεπίδρασης Coulomb, και (β) μιας έμμεσης ελκτικής αλληλεπίδρασης που προχωρεί μέσω της σύζευξης των ηλεκτρονίων με τις ταλαντώσεις του ιοντικού πλέγματος (φωνόνια). Όπως συζητήθηκε εκτενώς στο Κεφάλαιο 7, η ενεργός Χαμιλτονιανή BCS που περιγράφει τέτοιου είδους συστήματα έχει τη μορφή (7.61)

$$H - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\circ} - \mu) a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad (14.1)$$

όπου οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής επιπέδων κυμάτων, $a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ και $a_{\mathbf{k}\sigma}$, υπακούουν τις αντιμεταθετικές σχέσεις (5.2), ενώ η σχέση διασποράς έχει τη γενική ιδιότητα συμμετρίας: $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{\circ} = \varepsilon_{-\mathbf{k}}^{\circ}$. Υπενθυμίζουμε ότι το ενεργό δυναμικό, $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, το οποίο περιγράφει την ελκτική ενεργό αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου, θεωρείται ως μια συνάρτηση πραγματικών τιμών που ικανοποιεί τις απλές ιδιότητες συμμετρίας (7.62).

Σκοπός του παρόντος κεφαλαίου είναι μια σύντομη παρουσίαση της μικροσκοπικής θεωρίας BCS για την υπεραγώγιμη φάση των μεταλλικών συστημάτων που περιγράφονται από την (14.1), χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των εξισώσεων κίνησης των συναρτήσεων Green, σε συνδυασμό με την προσέγγιση αποσύζευξης Hartree-Fock-Bogoliubov, που συνοψίζεται στις (13.3)–(13.4). Τα αποτελέσματα που θα προκύψουν αποτελούν γενίκευση, σε πεπερασμένες θερμοκρασίες, των αποτελεσμάτων του Κεφαλαίου 7, τα οποία αφορούσαν αποκλειστικά τη μηδενική θερμοκρασία.

Υπενθυμίζεται ότι αφετηρία της θεωρίας BCS υπήρξε η πρόταση του Cooper σύμφωνα με την οποία: η θεμελιώδης κατάσταση ενός κανονικού μεταλλικού συστήματος, δηλ. η θάλασσα Fermi, γίνεται ασταθής, παρουσία της ελκτικής αλληλεπίδρασης $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ μεταξύ των ηλεκτρονίων. Είναι λοιπόν χρήσιμο, ως προοίμιο της μελέτης της υπεραγωγίμης φάσης, να παρουσιάσουμε στην πρώτη παράγραφο αυτού του κεφαλαίου μια σύντομη μελέτη της αστάθειας Cooper της κανονικής φάσης του συστήματος, δηλ. της φάσης υψηλών θερμοκρασιών, χρησιμοποιώντας την προσέγγιση T -πίνακα. Δεδομένης της πρακτικά μηδενικής εμβέλειας της αλληλεπίδρασης $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ στον πραγματικό χώρο,¹ η χρήση της προσέγγισης T -πίνακα σε αυτό το πλαίσιο είναι, κατ' αρχήν, επιτρεπτή. Παρ' όλα αυτά, ο ελκτικός χαρακτήρας της αλληλεπίδρασης αποδεικνύεται καταλυτικός σε χαμηλές θερμοκρασίες, οδηγώντας στην κατάρρευση της προσέγγισης T -πίνακα σε μια ορισμένη κρίσιμη τιμή της θερμοκρασίας. Το γεγονός αυτό σηματοδοτεί την αστάθεια της κανονικής φάσης του συστήματος και την είσοδό του στην υπεραγωγίμη φάση.

14.1 Η αστάθεια Cooper

Συμβολίζοντας συλλογικά τους κβαντικούς αριθμούς ορμής και σπιν με $\alpha = (\mathbf{k}_\alpha, \sigma_\alpha), \beta = (\mathbf{k}_\beta, \sigma_\beta), \dots$, η ενεργός Χαμιλτονιανή BCS (14.1) έχει τη γενική μορφή (12.53). Τα στοιχεία πίνακα της ενεργού αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου, $v_{\alpha\beta,\gamma\delta}$, δίνονται από τον τύπο

$$v_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \left[-\frac{1}{V} V_{\mathbf{k}_\alpha \mathbf{k}_\gamma} \delta_{\sigma_\alpha, \sigma_\gamma} \right] \delta_{\mathbf{k}_\alpha + \mathbf{k}_\beta, 0} \delta_{\mathbf{k}_\gamma + \mathbf{k}_\delta, 0} \delta_{\sigma_\alpha + \sigma_\beta, 0} \delta_{\sigma_\gamma + \sigma_\delta, 0}, \quad (14.4)$$

ικανοποιώντας τόσο τις γενικές ιδιότητες συμμετρίας (3.218)–(3.219) όσο και τις σχέσεις (3.261)–(3.264), οι οποίες είναι χαρακτηριστικές των ομογενών συστημά-

¹Το ενεργό δυναμικό (7.86), $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, που προτάθηκε από τους BCS, αντιστοιχεί στον πραγματικό χώρο σε ένα ελκτικό δυναμικό αλληλεπίδρασης δύο-σωμάτων της μορφής

$$v(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -g\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \text{με } g > 0. \quad (14.2)$$

Η παρουσία της δ -συνάρτησης στην (14.2) είναι χαρακτηριστική της μηδενικής εμβέλειας της αλληλεπίδρασης, αν και είναι σημαντικό να υπενθυμίσουμε ότι αυτή αφορά αποκλειστικά τα ηλεκτρόνια που βρίσκονται μέσα σε έναν ενεργειακό φλοιό πάχους ω_D πάνω και κάτω από την επιφάνεια Fermi. Για την αντίστοιχη μορφή της ενεργού Χαμιλτονιανής BCS (14.1) στον χώρο των θέσεων, έχουμε ότι

$$H - \mu\hat{N} = \sum_{\sigma} \int d^3x \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} - \mu \right) \psi_{\sigma}(\mathbf{x}) - g \int d^3x \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{x}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{x}), \quad (14.3)$$

όπου οι τελεστές πεδίου $\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{x}), \psi_{\sigma}(\mathbf{x})$ υπακούουν τις αντιμεταθετικές σχέσεις (3.104), με $\zeta = -1$.

των. Επιπλέον, από το δεξιό μέλος της (14.4) γίνεται φανερό ότι η εν λόγω αλληλεπίδραση διατηρεί το σπιν· με άλλα λόγια, η κατάσταση σπιν \uparrow ή \downarrow του κάθε ηλεκτρονίου διατηρείται στη διεργασία σκέδασης.

Ας θεωρήσουμε τώρα την περιοχή υψηλών θερμοκρασιών όπου το μεταλλικό σύστημα βρίσκεται στην κανονική του φάση. Στο πλαίσιο της προσέγγισης T -πίνακα, και υιοθετώντας για τα στοιχεία πίνακα $T_{\alpha\beta,\gamma\delta}(z)$ μια δομή αντίστοιχη της (14.4)

$$T_{\alpha\beta,\gamma\delta}(z) = \left[-\frac{1}{V} T_{\mathbf{k}\alpha\mathbf{k}\gamma}(z) \delta_{\sigma\alpha,\sigma\gamma} \right] \delta_{\mathbf{k}\alpha+\mathbf{k}\beta,0} \delta_{\mathbf{k}\gamma+\mathbf{k}\delta,0} \delta_{\sigma\alpha+\sigma\beta,0} \delta_{\sigma\gamma+\sigma\delta,0} , \quad (14.5)$$

η εξίσωση Bethe-Salpeter (13.121) ανάγεται στην παρακάτω γραμμική ολοκληρωτική εξίσωση

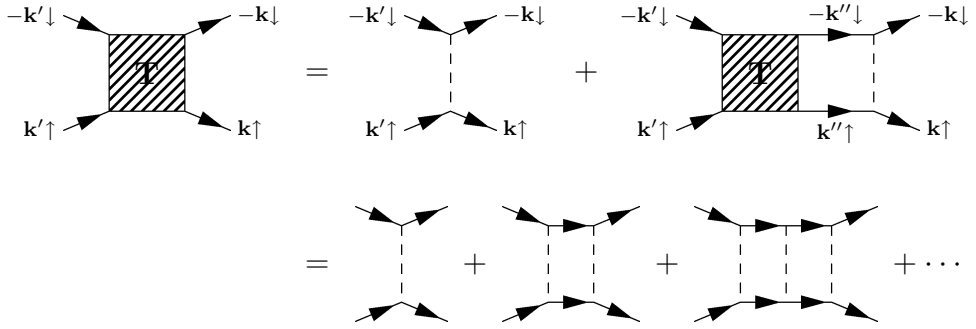
$$T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(z) = V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}''} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}''} \frac{1 - 2f(\varepsilon_{\mathbf{k}''})}{z - 2(\varepsilon_{\mathbf{k}''} - \mu)} T_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'}(z) , \quad (14.6)$$

όπου $f(\varepsilon)$ είναι η συνάρτηση κατανομής Fermi-Dirac (4.96).² Σύμφωνα με τη φυσική ερμηνεία του T -πίνακα που αναπτύξαμε στην παράγραφο 13.4.3, τα στοιχεία $T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(z)$ περιγράφουν την ενεργό αλληλεπίδραση δύο-ηλεκτρονίων και συγκεκριμένα τη διεργασία όπου: δύο ηλεκτρόνια με αρχική κατάσταση ($\mathbf{k}' \uparrow, -\mathbf{k}' \downarrow$) οδηγούνται μέσα από μιαν αλληλουχία πολλαπλών μεταξύ τους σκεδάσεων στην τελική κατάσταση ($\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$). Τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια του συστήματος επηρεάζουν την εν λόγω ενεργό αλληλεπίδραση μόνο μέσω της συνάρτησης κατανομής $f(\varepsilon_{\mathbf{k}''})$, η οποία εμφανίζεται στην (14.6) και η οποία περιορίζει τις διαθέσιμες ενδιάμεσες καταστάσεις σκέδασης ($\mathbf{k}'' \uparrow, -\mathbf{k}'' \downarrow$) του αλληλεπιδρώντος ζεύγους ηλεκτρονίων· βλ. Σχήμα 14.1.

Η αντίστοιχη ιδιοενέργεια (13.123) του ηλεκτρονίου, στην προσέγγιση T -πίνακα, είναι διαγώνια στους κβαντικούς αριθμούς ορμής και σπιν, όπως άλλωστε είναι αναμενόμενο για το παρόν ομογενές σύστημα. Μπορεί εύκολα να δειχθεί ότι

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(z) = -\frac{1}{V} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) T_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(z + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) . \quad (14.7)$$

² Ακολουθώντας μια πάγια τακτική στη θεωρία της υπεραγωγιμότητας, θεωρούμε ότι: η ποσότητα $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ που εμφανίζεται στην (14.6), καθώς και στις υπόλοιπες εξισώσεις αυτής της παραγράφου, ισούται με την αρχική μονοσωματιδιακή σχέση διασποράς των ηλεκτρονίων $\varepsilon_{\mathbf{k}}^0$ περιλαμβανομένων όμως και όλων των τετριμμένων σε αυτήν διορθώσεων τύπου Hartree-Fock. Οι εν λόγω διορθώσεις θεωρούνται ότι είναι ανεξάρτητες του σπιν, άρτιες συναρτήσεις του \mathbf{k} , και ίδιες τόσο στην κανονική όσο και στην υπεραγωγίμη φάση του συστήματος. Σε πρακτικούς υπολογισμούς χρησιμοποιείται η συνήθης παραβολική μορφή: $\varepsilon_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}|^2/(2m)$.



Σχήμα 14.1: Γραφική παράσταση του T -πίνακα (σκιασμένο τετράγωνο) ως η ενεργός αλληλεπίδραση δύο-ηλεκτρονίων, $T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(z)$, που μας υποβάλλει η εξίσωση Bethe-Salpeter (14.6). Η συχνότητα z χαρακτηρίζει την ολική ενέργεια του ζεύγους ($\mathbf{k}' \uparrow, -\mathbf{k}' \downarrow$) των εισερχομένων ηλεκτρονίων.

Η έκφραση (14.7) για την ιδιοενέργεια είναι ανεξάρτητη του σπιν σ και, συνεπώς, το ίδιο θα ισχύει για τη σχέση διασποράς των ηλεκτρονίων $E_{\mathbf{k}}$ που προκύπτει τώρα από το γενικό αποτέλεσμα (12.111) και τη συζήτηση που το ακολουθεί

$$E_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \frac{1}{V} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \text{Re}[T_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^r(2(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu))], \quad (14.8)$$

όπου $T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^r(\omega) = T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega + i\eta)$ είναι ο retarded T -πίνακας. Το αποτέλεσμα (14.8) αναδεικνύει την ιδιαίτερη σημασία του retarded T -πίνακα σε μηδενική συχνότητα, δεδομένου ότι: η τιμή $T_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^r(0)$ προσδιορίζει τη διόρθωση στη σχέση διασποράς των ηλεκτρονίων που βρίσκονται πάνω στην επιφάνεια Fermi, δηλ. των ηλεκτρονίων με κυματανύσματα τέτοια ώστε $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \mu$.

Η εξίσωση Bethe-Salpeter (14.6) επιλύεται υιοθετώντας για το ενεργό δυναμικό, $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, τη χωριζόμενη μορφή (7.86)

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = g\theta(\omega_D - |\xi_{\mathbf{k}}|)\theta(\omega_D - |\xi_{\mathbf{k}'}|), \quad (14.9)$$

όπου, εξ ορισμού,

$$\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu. \quad (14.10)$$

Πράγματι, σε αυτήν την περίπτωση ελέγχεται εύκολα από την (14.6) ότι τα στοιχεία πίνακα $T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(z)$ έχουν την αντίστοιχη χωριζόμενη μορφή

$$T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(z) = T(z)\theta(\omega_D - |\xi_{\mathbf{k}}|)\theta(\omega_D - |\xi_{\mathbf{k}'}|), \quad (14.11)$$

με τη συνάρτηση $T(z)$ να δίνεται από τον τύπο

$$T(z) = g \left[1 + \frac{g}{V} \sum_{\mathbf{k}} \theta(\omega_D - |\xi_{\mathbf{k}}|) \frac{\tanh(\beta \xi_{\mathbf{k}}/2)}{z - 2\xi_{\mathbf{k}}} \right]^{-1}. \quad (14.12)$$

Μετατρέποντας το \mathbf{k} -άθροισμα σε ολοκλήρωμα με τη βοήθεια της πυκνότητας καταστάσεων (7.89), $N(\xi)$, και χρησιμοποιώντας τη συνήθη προσέγγιση (7.90), η παραπάνω έκφραση για τη συνάρτηση $T(z)$ γράφεται τελικά με τη μορφή

$$T(z) = g \left[1 + gN(0) \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh(\beta \xi/2)}{z - 2\xi} \right]^{-1}. \quad (14.13)$$

Η τιμή $N(0)$ ταυτίζεται με την πυκνότητα καταστάσεων στην επιφάνεια Fermi, που προσδιορίζεται από το χημικό δυναμικό μ .

Λόγω του ελκτικού χαρακτήρα ($g > 0$) του δυναμικού αλληλεπίδρασης, η συνάρτηση $T(z)$ εμφανίζει μια ανεπίτρεπτη συμπεριφορά σε χαμηλές θερμοκρασίες: εμφανίζει μιγαδικούς πόλους, δηλ. πόλους εκτός του πραγματικού άξονα, για τιμές του z κοντά στο 0. Προκειμένου να αναδείξουμε αυτήν τη συμπεριφορά, ας υπολογίσουμε τη συνάρτηση $T(z)$ για φανταστικές τιμές του z , δηλ. $z = iy$, όπου y είναι ένας μη μηδενικός πραγματικός αριθμός. Σε αυτήν την περίπτωση, η έκφραση (14.13) ανάγεται στην

$$T(z = iy) = g \left[1 - gN(0) \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{4\xi \tanh(\beta \xi/2)}{y^2 + 4\xi^2} \right]^{-1}. \quad (14.14)$$

Εάν η θερμοκρασία είναι αρκετά υψηλή, έτσι ώστε

$$1 > gN(0) \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh(\beta \xi/2)}{\xi}, \quad (14.15)$$

τότε η (14.14) δεν έχει πόλους για πραγματικές τιμές του y , δηλ. για μιγαδικές τιμές του z . Από την άλλη μεριά, εάν η θερμοκρασία είναι αρκετά χαμηλή, έτσι ώστε

$$1 \leq gN(0) \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh(\beta \xi/2)}{\xi}, \quad (14.16)$$

θα υπάρχουν πόλοι για πραγματικές τιμές του y . Πράγματι, για αρκετά χαμηλές θερμοκρασίες η τιμή του ολοκληρώματος στην (14.14) μπορεί να γίνει οσοδήποτε μεγάλη. Για παράδειγμα, στο όριο μηδενικής θερμοκρασίας ($\beta \rightarrow \infty$) έχουμε $\tanh(\beta|\xi|/2) = 1$ και επομένως

$$\int_0^{\omega_D} d\xi \frac{4\xi}{y^2 + 4\xi^2} = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{y^2 + 4\omega_D^2}{y^2} \right]. \quad (14.17)$$

Το ολοκλήρωμα (14.17) μπορεί λοιπόν να γίνει οσοδήποτε μεγάλο επιλέγοντας μια αρκετά μικρή τιμή της παραμέτρου y .

Συμπερασματικά, σε υψηλές θερμοκρασίες τα στοιχεία πίνακα $T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(z)$ δεν εμφανίζουν μιγαδικούς πόλους και επομένως η προσέγγιση T -πίνακα είναι απολύτως συνεπής. Αντιθέτως, σε χαμηλές θερμοκρασίες έχουμε την εμφάνιση μιγαδικών πόλων, γεγονός που παραβιάζει τις αναλυτικές ιδιότητες του T -πίνακα. Η εμφάνιση μιγαδικών πόλων στη συνάρτηση $T(z)$ υποδηλώνει ότι η κανονική φάση του συστήματος, στο πλαίσιο της οποίας εφαρμόζεται η προσέγγιση T -πίνακα, γίνεται ασταθής λόγω κάποιας δραστικής μεταβολής των ιδιοτήτων του συστήματος σε χαμηλές θερμοκρασίες. Συγκεκριμένα, η εμφάνιση μιγαδικών πόλων οφείλεται στο γεγονός ότι: σε χαμηλές θερμοκρασίες, ζεύγη σωματιδίων πάνω στην επιφάνεια Fermi, με μηδενική ολική ορμή και αντιπαράλληλα σπιν, δημιουργούν δέσμιες καταστάσεις –ζεύγη Cooper– προκαλώντας τη μετάβαση του συστήματος στην υπεραγώγιμη φάση. Η κρίσιμη θερμοκρασία, T_c , στην οποία εμφανίζεται η εν λόγω μετάβαση ταυτίζεται με τη θερμοκρασία στην οποία η συνθήκη (14.16) ισχύει με το σύμβολο της ισότητας. Με άλλα λόγια, έχουμε ότι³

$$1 = gN(0) \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh(\beta_c \xi/2)}{\xi} = gN(0) \ln \left(\frac{2e^\gamma \omega_D}{\pi k_B T_c} \right), \quad (14.18)$$

όπου $\beta_c = (k_B T_c)^{-1}$ και $\gamma \approx 0.577$ είναι η σταθερά του Euler (A.60). Από την (14.18) έπεται ισοδύναμα ότι

$$k_B T_c = \frac{2e^\gamma}{\pi} \omega_D e^{-1/gN(0)} \approx 1.13 \omega_D e^{-1/gN(0)}. \quad (14.19)$$

Η έκφραση (14.19) για την κρίσιμη θερμοκρασία μάς βεβαιώνει ότι στο όριο ασθενούς σύζευξης, $gN(0) \ll 1$, έχουμε: $k_B T_c \ll \omega_D$.

Ένας άλλος τρόπος να συμπεράνουμε την κατάρρευση της προσέγγισης T -πίνακα σε χαμηλές θερμοκρασίες είναι μέσω του υπολογισμού της retarded συνάρτησης, $T^r(\omega) = T(\omega + i\eta)$, για την τιμή $\omega = 0$. Πράγματι, δεν είναι δύσκολο να δείξουμε ότι

$$T^r(0) = g \left[1 - gN(0) \ln \left(\frac{2e^\gamma \omega_D}{\pi k_B T} \right) \right]^{-1}, \quad \text{με } k_B T \ll \omega_D. \quad (14.20)$$

Για το υπό μελέτη ελκτικό δυναμικό ($g > 0$) το δεξιό μέλος της παραπάνω έκφρασης απειρίζεται λογαριθμικά ακριβώς στην κρίσιμη θερμοκρασία $T = T_c$: βλ. (14.18).

³Ο λεπτομερής υπολογισμός του ξ-ολοκληρώματος (14.18) στη συνήθη περιοχή θερμοκρασιών, $k_B T \ll \omega_D$, παρουσιάζεται αργότερα: βλ. (14.49)–(14.50).

Ο εν λόγω απειρισμός συνεπάγεται τον αντίστοιχο απειρισμό της σχέσης διασποράς (14.8), $E_{\mathbf{k}\sigma}$, των ηλεκτρονίων που βρίσκονται πάνω στην επιφάνεια Fermi, δηλ. των ηλεκτρονίων με κυματανύσματα τέτοια ώστε $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \mu$. Ο απαράδεκτος από φυσική άποψη αυτός απειρισμός σηματοδοτεί την κατάρρευση της προσέγγισης T -πίνακα σε χαμηλές θερμοκρασίες και κατ' επέκταση την αστάθεια της κανονικής φάσης του συστήματος ως προοίμιο της εισόδου του στην υπεραγώγιμη φάση. Όπως θα δείξουμε στη συνέχεια αυτού του κεφαλαίου, η έκφραση (14.19) ταυτίζεται πράγματι με το περίφημο αποτέλεσμα της θεωρίας BCS για την κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης T_c ενός υπεραγωγού· βλ. (14.53).

14.2 Οι εξισώσεις κίνησης

Στο υπόλοιπο αυτού του κεφαλαίου θα θεωρήσουμε την περιοχή χαμηλών θερμοκρασιών όπου το μεταλλικό σύστημα βρίσκεται πλέον στην υπεραγώγιμη φάση του. Επιστρέφοντας στη Χαμιλτονιανή BCS (14.1) και χρησιμοποιώντας το κεντρικό αποτέλεσμα (12.12), έχουμε για την εξίσωση κίνησης της συνάρτησης Green ενός-σωματιδίου ότι

$$z \langle\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z = \langle\{a_{\mathbf{k}\uparrow}, a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger\}\rangle + \langle\langle [a_{\mathbf{k}\uparrow}, H - \mu\hat{N}]; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z. \quad (14.21)$$

Χρησιμοποιώντας τις αντιμεταθετικές σχέσεις (5.2) και την ταυτότητα (3.74) για τον υπολογισμό των μεταθετών, η εξίσωση κίνησης (14.21) παίρνει την ισοδύναμη μορφή (άσκηση)

$$[z - (\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 - \mu)] \langle\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z = 1 - \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z. \quad (14.22)$$

Για την καινούργια συνάρτηση Green δύο-σωματιδίων που εμφανίζεται στο δεξιό μέλος της (14.22) πραγματοποιούμε τώρα την προσέγγιση αποσύζευξης Hartree-Fock-Bogoliubov (13.3), με $\zeta = -1$. Συγκεκριμένα, έχουμε την προσέγγιση

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z &\simeq \langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow} \rangle \langle\langle a_{\mathbf{k}'\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z \\ &\quad - \langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \langle\langle a_{-\mathbf{k}'\downarrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z \\ &\quad + \langle a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z. \end{aligned} \quad (14.23)$$

Ως συνήθως, η προσέγγιση αποσύζευξης συμπληρώνεται και απλουστεύεται υποθέτοντας αυτοσυνεπώς την ιδιότητα (13.13), δηλαδή

$$\langle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle. \quad (14.24)$$

Η (14.24) αποτελεί μια λογική παραδοχή, όσον αφορά τουλάχιστον την περιγραφή της ομογενούς υπεραγωγίμης και κανονικής φάσης του συστήματος.

Με τη βοήθεια των (14.23)–(14.24) η εξίσωση κίνησης (14.22) παίρνει την τελική μορφή

$$(z - \xi_{\mathbf{k}}) \langle\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z + \Delta_{\mathbf{k}} \langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z = 1, \quad (14.25)$$

όπου $\Delta_{\mathbf{k}}$ είναι η λεγόμενη “συνάρτηση χάσματος BCS”, η οποία ορίζεται από τη σχέση

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle, \quad (14.26)$$

σε αναλογία με την (7.121). Στην (14.25) σημειώνουμε με $\xi_{\mathbf{k}}$ την ποσότητα (14.10), $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$, όπου, εξ ορισμού: $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^0 - \frac{1}{V} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}} \langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle$. Στο θερμοδυναμικό όριο ($V \rightarrow \infty$) που μας ενδιαφέρει έχουμε, προφανώς, ότι: $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^0$. Επομένως, η ποσότητα $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ είναι, πράγματι, ανεξάρτητη του σπιν σ και έχει την ιδιότητα συμμετρίας: $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{-\mathbf{k}}$. Γενικότερα, η ποσότητα $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ θεωρείται ότι ενσωματώνει όλες τις τετριμμένες διορθώσεις τύπου Hartree-Fock στη μονοσωματιδιακή σχέση διασποράς των ηλεκτρονίων. Οι διορθώσεις αυτές θεωρούνται ότι είναι ανεξάρτητες του σπιν, άρτιες συναρτήσεις του \mathbf{k} , και ίδιες τόσο στην κανονική όσο και στην υπεραγωγίμη φάση του συστήματος. Σε πρακτικούς υπολογισμούς χρησιμοποιείται η συνήθης παραβολική μορφή: $\varepsilon_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}|^2 / (2m)$.

Προκειμένου να οδηγηθούμε σε ένα κλειστό σύστημα εξισώσεων κίνησης, πρέπει τώρα να γράψουμε και την εξίσωση κίνησης για την ανώμαλη συνάρτηση Green $\langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z$ που εμφανίζεται στην (14.25). Σύμφωνα με το κεντρικό αποτέλεσμα (12.12), η εξίσωση κίνησης για την εν λόγω συνάρτηση Green έχει τη μορφή

$$z \langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z = \langle \{ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \} \rangle + \langle\langle [a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, H - \mu \hat{N}]; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z, \quad (14.27)$$

απ' όπου έπεται ισοδύναμα ότι (άσκηση)

$$[z + (\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 - \mu)] \langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle\langle a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z. \quad (14.28)$$

Για την καινούργια συνάρτηση Green δύο-σωματιδίων που εμφανίζεται στο δεξιό μέλος της (14.28) πραγματοποιούμε την προσέγγιση αποσύζευξης Hartree-Fock-Bogoliubov (13.4), με $\zeta = -1$. Συγκεκριμένα, έχουμε την προσέγγιση

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z &\simeq \langle a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle \langle\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z \\ &\quad - \langle a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \langle\langle a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z \\ &\quad + \langle a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \langle\langle a_{\mathbf{k}'\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z. \end{aligned} \quad (14.29)$$

Με τη βοήθεια της παραπάνω προσέγγισης αποσύζευξης και χρησιμοποιώντας την υπόθεση (14.24), καθώς και την απλή ιδιότητα (4.14), η εξίσωση κίνησης (14.28) παίρνει την τελική μορφή

$$(z + \xi_{\mathbf{k}}) \langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z + \Delta_{\mathbf{k}}^* \langle\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z = 0. \quad (14.30)$$

Οι (14.25) και (14.30) αποτελούν πλέον ένα κλειστό σύστημα εξισώσεων η λύση του οποίου οδηγεί αμέσως στις παρακάτω απλές εκφράσεις για την κανονική και την ανώμαλη συνάρτηση Green ενός-σωματιδίου:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z &= \frac{z + \xi_{\mathbf{k}}}{z^2 - (\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2)} = \frac{z + \xi_{\mathbf{k}}}{z^2 - E_{\mathbf{k}}^2}, \\ \langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z &= -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{z^2 - (\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2)} = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{z^2 - E_{\mathbf{k}}^2}, \end{aligned} \quad (14.31)$$

όπου, σε αναλογία με την (7.75), η ποσότητα $E_{\mathbf{k}}$ ορίζεται από τη σχέση

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}. \quad (14.32)$$

Τα αποτελέσματα (14.31) μπορούν να γραφούν και με την παρακάτω χρήσιμη ισοδύναμη μορφή:

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) \frac{1}{z - E_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) \frac{1}{z + E_{\mathbf{k}}}, \\ \langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z &= -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{2E_{\mathbf{k}}} \left(\frac{1}{z - E_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{z + E_{\mathbf{k}}}\right). \end{aligned} \quad (14.33)$$

Οι συναρτήσεις Green ενός-σωματιδίου (14.33) έχουν πόλους στις ενέργειες $\pm E_{\mathbf{k}}$. Επομένως, η ποσότητα $E_{\mathbf{k}}$ που ορίζεται από τον τύπο (14.32) προσδιορίζει τη σχέση διασποράς των οιονεί-σωματιδίων στον υπεραγωγό. Έτσι λοιπόν, στην περίπτωση όπου $\Delta_{\mathbf{k}} \neq 0$ έχουμε, πράγματι, την εμφάνιση ενός χάσματος $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ στο ενεργειακό φάσμα των οιονεί-σωματιδίων του συστήματος.

Από τον ορισμό (14.26) της συνάρτησης χάσματος $\Delta_{\mathbf{k}}$ και με τη βοήθεια της (4.14) και της ταυτότητας (9.52), με $\zeta = -1$, έπεται ότι

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}}^* &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow} \rangle \\ &= \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} e^{i\omega_n \eta} \langle\langle a_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_{i\omega_n}. \end{aligned} \quad (14.34)$$

Το ω_n -άθροισμα στην (14.34) είναι πάνω στις φερμιονικές ($\zeta = -1$) θερμικές συχνότητες (9.50), δηλ. πάνω στις συχνότητες $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$, με $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Ο τύπος (14.34) είναι εξαιρετικά χρήσιμος διότι επιτρέπει τον αυτοσυνεπή υπολογισμό της συνάρτησης χάσματος ξεκινώντας από το αντίστοιχο αποτέλεσμα για την ανώμαλη συνάρτηση Green. Πράγματι, αξιοποιώντας την ταυτότητα (10.132), με $\zeta = -1$, έχουμε διαδοχικά από τις (14.33)–(14.34) ότι

$$\begin{aligned}\Delta_{\mathbf{k}}^* &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}^*}{2E_{\mathbf{k}'}} \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n \eta} \left(\frac{1}{i\omega_n - E_{\mathbf{k}'}} - \frac{1}{i\omega_n + E_{\mathbf{k}'}} \right) \\ &= -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}^*}{2E_{\mathbf{k}'}} \left(\frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}'}} + 1} - \frac{1}{e^{-\beta E_{\mathbf{k}'}} + 1} \right) \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}^*}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh \left(\frac{1}{2} \beta E_{\mathbf{k}'} \right),\end{aligned}\quad (14.35)$$

απ' όπου, παίρνοντας τον μιγαδικό συζυγή και των δύο μελών, έπεται τελικά ότι

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh \left(\frac{1}{2} \beta E_{\mathbf{k}'} \right). \quad (14.36)$$

Η μη γραμμική ολοκληρωτική εξίσωση (14.36), γνωστή και ως η “εξίσωση χάσματος BCS”, προσδιορίζει αυτοσυνεπώς τη συνάρτηση χάσματος $\Delta_{\mathbf{k}}$ σε πεπερασμένες θερμοκρασίες, γενικεύοντας έτσι το παλαιότερο αντίστοιχο αποτέλεσμα (7.79) που αφορούσε αποκλειστικά τη μηδενική θερμοκρασία. Σε πρακτικούς υπολογισμούς είναι χρήσιμη και η παρακάτω, λιγότερο συμπαγής αλλά ισοδύναμη, μορφή της εξίσωσης χάσματος BCS, που προκύπτει επίσης άμεσα από τις (14.33)–(14.34)

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{\omega_n^2 + E_{\mathbf{k}'}}. \quad (14.37)$$

Σημειώνουμε ότι η παρουσία του ω_n^2 στον παρανομαστή του δεξιού μέλους της (14.37) εξασφαλίζει τη σύγκλιση του ω_n -αθροίσματος, γεγονός που μας επέτρεψε να αγνοήσουμε τον παράγοντα $e^{i\omega_n \eta}$, δηλ. να θέσουμε ευθύς εξαρχής $\eta = 0$. Η ισοδυναμία της (14.37) με την (14.36) γίνεται επίσης φανερή και από την ταυτότητα (10.148).

Για να έχουμε μια πιο πλήρη εικόνα των συναρτήσεων Green ενός-σωματιδίου, είναι χρήσιμο να επαναλάβουμε την παραπάνω διαδικασία υπολογισμού για τις συναρτήσεις με δείκτες που προκύπτουν από τους αρχικούς με την πράξη “αντιστροφής χρόνου”: $(\mathbf{k}, \sigma) \rightsquigarrow (-\mathbf{k}, -\sigma)$. Με άλλα λόγια, είναι χρήσιμο να υπολογίσουμε την

κανονική συνάρτηση Green $\langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}; a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_z$ και την αντίστοιχη ανώμαλη συνάρτηση Green $\langle\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger; a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_z$. Ο υπολογισμός αυτός δεν παρουσιάζει καμία νέα δυσκολία και οδηγεί στα απλά αποτελέσματα (άσκηση):

$$\begin{aligned} \langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}; a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_z &= \langle\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) \frac{1}{z - E_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) \frac{1}{z + E_{\mathbf{k}}}, \\ \langle\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger; a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_z &= -\langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{2E_{\mathbf{k}}} \left(\frac{1}{z - E_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{z + E_{\mathbf{k}}} \right). \end{aligned} \quad (14.38)$$

Ενόψει των εκφράσεων (14.33), τα αποτελέσματα (14.38) είναι αναμενόμενα διότι, απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, η πράξη “αντιστροφής χρόνου” $(\mathbf{k}, \sigma) \rightsquigarrow (-\mathbf{k}, -\sigma)$ αφήνει αναλλοίωτη τη Χαμιλτονιανή (14.1) ενώ παράλληλα οδηγεί, λόγω της αντιμεταθετικότητας $a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow} = -a_{\mathbf{k}'\uparrow} a_{-\mathbf{k}'\downarrow}$, στην αντικατάσταση: $\Delta_{\mathbf{k}} \rightsquigarrow -\Delta_{\mathbf{k}}$. βλ. ορισμό (14.26). Ας σημειωθεί ότι το παραπάνω αποτέλεσμα για την ανώμαλη συνάρτηση Green $\langle\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger; a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_z$ μπορεί να αποδειχθεί και με έναν άμεσο τρόπο χρησιμοποιώντας τη ρητή μορφή (14.33) της ανώμαλης συνάρτησης Green $\langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z$ και την ταυτότητα (10.38), με $\zeta = -1$. Με τη βοήθεια της (14.38), ο αριθμός σωματιδίων για δοσμένο χημικό δυναμικό υπολογίζεται (άσκηση) από την (12.89) ως

$$\begin{aligned} \langle \hat{N} \rangle &= \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_n e^{i\omega_n \eta} \langle\langle a_{\mathbf{k}\sigma}; a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_{i\omega_n} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left[1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tanh \left(\frac{1}{2} \beta E_{\mathbf{k}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (14.39)$$

Η (14.39) αποτελεί τη γενίκευση, σε πεπερασμένες θερμοκρασίες, του παλαιότερου αντίστοιχου αποτελέσματος (7.81), που αφορούσε αποκλειστικά τη μηδενική θερμοκρασία.

Οι απλές ιδιότητες συμμετρίας (7.62) που ικανοποιεί η ελκτική ενεργός αλληλεπίδραση $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, σε συνδυασμό με την (14.36), ή ισοδύναμα την (14.37), οδηγούν στο συμπέρασμα ότι: η συνάρτηση χάσματος $\Delta_{\mathbf{k}}$ σε πεπερασμένες θερμοκρασίες μπορεί να θεωρηθεί αυτοσυνεπώς ως μια άρτια συνάρτηση του κυματανύσματος \mathbf{k} , δηλαδή

$$\boxed{\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_{-\mathbf{k}},} \quad (14.40)$$

σε αντιστοιχία με το αποτέλεσμα (7.71) για μηδενικές θερμοκρασίες. Στο εξής, σε όλο το παρόν κεφάλαιο, θα εννοείται πάντα ότι η συνάρτηση χάσματος $\Delta_{\mathbf{k}}$ ικανοποιεί την ιδιότητα συμμετρίας (14.40). Ενόψει της (14.38), μια άμεση απόρροια της

(14.40) είναι η παρακάτω ισότητα

$$\langle\langle a_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle\rangle_z = -\langle\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle\rangle_z . \quad (14.41)$$

Η αντισυμμετρικότητα της ανώμαλης συνάρτησης Green στην εναλλαγή των δεικτών του σπιν, όπως σημειώνεται στην (14.41), αντιστοιχεί στο φυσικό γεγονός ότι καθένα από τα δέσμια ζεύγη ηλεκτρονίων της υπεραγώγιμης φάσης, δηλ. καθένα ζεύγος Cooper, βρίσκεται σε μια σπιν-μονομελή (spin-singlet) κατάσταση.

Ένας εναλλακτικός τρόπος υπολογισμού

Τα ρητά αποτελέσματα (14.38) για τις συναρτήσεις Green μπορούν να εξαχθούν εμπεδώνοντας την προσέγγιση Hartree-Fock-Bogoliubov όχι με τη συνήθη μορφή αποσύζευξης των εξισώσεων κίνησης αλλά, ισοδύναμα, με τη μορφή προσέγγισης του ίδιου του τελεστή αλληλεπίδρασης των σωματιδίων που εμφανίζεται στη Χαμιλτονιανή BCS (14.1). Συγκεκριμένα, ακολουθώντας την αναλογία με την προσέγγιση Hartree-Fock-Bogoliubov για τις μέσες τιμές (13.5), και υποθέτοντας αυτοσυνεπώς την ιδιότητα (14.24), προσεγγίζουμε τον τελεστή αλληλεπίδρασης δύο-σωμάτων με έναν τελεστή ενός-σώματος

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow} &\simeq \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} + \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ &+ \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow} + \langle a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger . \end{aligned} \quad (14.42)$$

Η προσέγγιση (14.42) περιγράφεται συνοπτικά λέγοντας ότι αγνοούμε τις διακυμάνσεις των τελεστών $a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma}$, $a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$, $a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}$, γύρω από τις αντίστοιχες μέσες τιμές τους $\langle a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$, $\langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle$, $\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$.

Με τη βοήθεια της προσέγγισης (14.42) η Χαμιλτονιανή BCS (14.1) απλουστεύεται στην παρακάτω τετραγωνική μορφή (άσκηση)

$$\boxed{H - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger a_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \right) ,} \quad (14.43)$$

όπου $\Delta_{\mathbf{k}}$ είναι η συνάρτηση χάσματος η οποία ορίζεται από τη σχέση (14.26) και $\xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$, όπως σημειώνεται στην (14.10). Η ποσότητα $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ που εμφανίζεται στην (14.10) ενσωματώνει στη μονοσωματιδιακή σχέση διασποράς των ηλεκτρονίων τις τετριμμένες διορθώσεις τύπου Hartree-Fock που προκύπτουν από τους δύο πρώτους όρους του δεξιού μέλους της (14.42). Υπενθυμίζουμε ότι οι εν λόγω διορθώσεις θεωρούνται ότι είναι ανεξάρτητες του σπιν, άρτιες συναρτήσεις του \mathbf{k} (επομένως,

$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{-\mathbf{k}}$), και ίδιες τόσο στην κανονική όσο και στην υπεραγωγίμη φάση του συστήματος.

Ξεκινώντας από την απλουστευμένη μορφή της Χαμιλτονιανής BCS (14.43), είναι εύκολο να ελεγχθεί ότι οι αντίστοιχες εξισώσεις κίνησης για τις συναρτήσεις Green ταυτίζονται, χωρίς περαιτέρω προσεγγίσεις, με τις (14.25) και (14.30). Επομένως, οδηγούμαστε στα ίδια ρητά αποτελέσματα (14.38) για τις συναρτήσεις Green τα οποία επιτρέπουν, μεταξύ άλλων, τον αυτοσυνεπή υπολογισμό των μέσων τιμών που εμφανίζονται στο δεξιό μέλος της (14.42). Ειδικότερα για τη συνάρτηση χάσματος $\Delta_{\mathbf{k}}$ προκύπτει, όπως είναι αναμενόμενο, η εξίσωση χάσματος BCS (14.36) ή η ισοδύναμη μορφή της (14.37).

Οι παραπάνω παρατηρήσεις αιτιολογούν τη χρήση της Χαμιλτονιανής (14.43) ως αφετηρίας διαφόρων απλών υπολογισμών στη θεωρία της υπεραγωγιμότητας.

14.3 Επίλυση της εξίσωσης χάσματος

Τα ρητά αποτελέσματα της προηγούμενης παραγράφου επιτρέπουν, χωρίς περιορισμό της γενικότητας, να θεωρήσουμε τη συνάρτηση χάσματος $\Delta_{\mathbf{k}}$ ως μια συνάρτηση πραγματικών τιμών, δηλ. $\Delta_{\mathbf{k}}^* = \Delta_{\mathbf{k}}$. Η δυνατότητα μιας τέτοιας απλούστευσης, την οποία στο εξής υιοθετούμε, οφείλεται στη συμμετρία “αντιστροφής χρόνου” της Χαμιλτονιανής, απουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.

Οι δύο ισοδύναμες μορφές της εξίσωσης χάσματος για πεπερασμένες θερμοκρασίες (14.36)–(14.37) επιλύονται υιοθετώντας, όπως και στην περίπτωση μηδενικής θερμοκρασίας, τη χωριζόμενη μορφή (14.9) για την ελκτική ενεργό αλληλεπίδραση $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Σε αυτήν την περίπτωση συμπεραίνουμε εύκολα ότι η συνάρτηση χάσματος $\Delta_{\mathbf{k}}$ έχει τη γενική μορφή

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta(T)\theta(\omega_D - |\xi_{\mathbf{k}}|), \quad (14.44)$$

όπου η μη μηδενική “παράμετρος χάσματος BCS”, $\Delta(T)$, γνωστή και ως “ενεργειακό χάσμα BCS”, εξαρτάται από τη θερμοκρασία και ικανοποιεί την εξίσωση

$$\frac{1}{gN(0)} = \frac{2}{\beta} \int_0^{\omega_D} d\xi \sum_n \frac{1}{\omega_n^2 + \xi^2 + \Delta^2(T)} \quad (14.45)$$

$$= \int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}} \tanh \left[\frac{1}{2} \beta \sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)} \right]. \quad (14.46)$$

Οι δύο ισοδύναμες μορφές της εξίσωσης χάσματος (14.45)–(14.46) προκύπτουν από τις (14.36)–(14.37) υιοθετώντας τη συνήθη προσέγγιση (7.90) και ακολουθώντας

μια διαδικασία ανάλογη με αυτήν που οδηγεί στην (7.91), της οποίας και αποτελούν γενίκευση σε πεπερασμένες θερμοκρασίες. Η τιμή $N(0)$ ταυτίζεται με την πυκνότητα καταστάσεων στην επιφάνεια Fermi, που προσδιορίζεται από το χημικό δυναμικό μ , σύμφωνα με τον γενικό ορισμό (7.89).

Σε μηδενική θερμοκρασία, $T \rightarrow 0$, η εξίσωση χάσματος (14.46) ανάγεται στην (7.91) και επομένως, στο όριο ασθενούς σύζευξης ($gN(0) \ll 1$), προβλέπει την τιμή (7.92) για την παράμετρο χάσματος, δηλαδή

$$\Delta_0 \equiv \Delta(T=0) = 2\omega_D \exp\left(-\frac{1}{gN(0)}\right). \quad (14.47)$$

Μια άλλη εξαιρετικά ενδιαφέρουσα τιμή είναι αυτή της κρίσιμης θερμοκρασίας μετάβασης T_c όπου, εξ ορισμού, η παράμετρος χάσματος μηδενίζεται: $\Delta(T_c) = 0$. Σε αυτήν την περίπτωση, η εξίσωση χάσματος (14.45)–(14.46) ανάγεται στη συνθήκη

$$\frac{1}{gN(0)} = \frac{2}{\beta_c} \int_0^{\omega_D} d\xi \sum_n \frac{1}{\omega_n^2 + \xi^2} = \int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\xi} \tanh\left(\frac{\xi}{2k_B T_c}\right), \quad (14.48)$$

όπου $\beta_c = 1/(k_B T_c)$ και το ω_n -άθροισμα εκτείνεται πάνω στις αντίστοιχες φερμιονικές θερμικές συχνότητες, $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta_c$. Από την (14.48) γίνεται ήδη φανερό ότι στο όριο ασθενούς σύζευξης ($gN(0) \ll 1$) θα έχουμε: $k_B T_c \ll \omega_D$. Με αφορμή την τελευταία παρατήρηση, πρέπει να τονίσουμε γενικότερα ότι, στο πλαίσιο της θεωρίας BCS, μας ενδιαφέρει μόνο η περιοχή θερμοκρασιών T όπου ικανοποιείται η ανισότητα: $k_B T \ll \omega_D$. Είναι λοιπόν χρήσιμο να υπολογίσουμε το παρακάτω άθροισμα⁴ για τυχαία θερμοκρασία T στην εν λόγω περιοχή

$$\begin{aligned} \frac{2}{\beta} \int_0^{\omega_D} d\xi \sum_n \frac{1}{\omega_n^2 + \xi^2} &= \int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\xi} \tanh\left(\frac{\xi}{2k_B T}\right) = \int_0^b \frac{dx}{x} \tanh x \\ &= \left[\ln x \tanh x \right]_{x=0}^{x=b} - \int_0^b dx \frac{\ln x}{\cosh^2 x} \\ &\approx \ln\left(\frac{\omega_D}{2k_B T}\right) - \int_0^\infty dx \frac{\ln x}{\cosh^2 x}, \end{aligned} \quad (14.49)$$

όπου ορίσαμε την αδιάστατη παράμετρο $b = \omega_D/(2k_B T)$ και χρησιμοποιήσαμε το γεγονός ότι: $b \gg 1$. Για το ορισμένο ολοκλήρωμα έχουμε ότι

$$\int_0^\infty dx \frac{\ln x}{\cosh^2 x} = -\ln\left(\frac{4e^\gamma}{\pi}\right), \quad (14.50)$$

⁴Η πρώτη ισότητα στην (14.49) προκύπτει άμεσα από την ταυτότητα (10.148).

όπου $\gamma \approx 0.577$ είναι η σταθερά του Euler (A.60). Συμπερασματικά, από τις (14.49)–(14.50) έπεται ο παρακάτω χρήσιμος τύπος για την άθροιση πάνω στις φερμιονικές θερμικές συχνότητες

$$\frac{2}{\beta} \int_0^{\omega_D} d\xi \sum_n \frac{1}{\omega_n^2 + \xi^2} = \ln \left(\frac{2e^\gamma \omega_D}{\pi k_B T} \right), \quad \text{με } k_B T \ll \omega_D. \quad (14.51)$$

Ενόψει της (14.51), η συνθήκη (14.48) παίρνει τη μορφή

$$\frac{1}{gN(0)} = \ln \left(\frac{2e^\gamma \omega_D}{\pi k_B T_c} \right), \quad (14.52)$$

απ' όπου έπεται το περίφημο αποτέλεσμα της θεωρίας BCS για την κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης T_c

$$k_B T_c = \frac{2e^\gamma}{\pi} \omega_D e^{-1/gN(0)} \approx 1.13 \omega_D e^{-1/gN(0)}. \quad (14.53)$$

Η (14.53) αποδεικνύει ότι το T_c είναι ανάλογο της χαρακτηριστικής φωνονικής συχνότητας Debye, $\omega_D \propto M^{-1/2}$, προσφέροντας έτσι μιαν απλή εξήγηση του ιστορικού φαινομένου που συζητήσαμε στην εξίσωση (7.28).⁵ Είναι αξιοσημείωτο ότι η παραπάνω έκφραση για το T_c ταυτίζεται με την πρόβλεψη (14.19) της προσέγγισης T -πίνακα για την κρίσιμη θερμοκρασία όπου η κανονική φάση του συστήματος γίνεται ασταθής, λόγω της εμφάνισης δέσμιων καταστάσεων ζευγών Cooper.

Η σύγκριση των αποτελεσμάτων (14.47) και (14.53) δείχνει ότι, τόσο η παράμετρος χάσματος σε μηδενική θερμοκρασία, Δ_0 , όσο και η θερμοκρασία μετάβασης, T_c , έχουν μια εκθετικά ευαίσθητη εξάρτηση από την αδιάστατη παράμετρο $gN(0)$. Η εξάρτηση όμως αυτή απαλείφεται σχηματίζοντας το αδιάστατο πηλίκο

$$\frac{2\Delta_0}{k_B T_c} = 2\pi e^{-\gamma} \approx 3.53, \quad (14.55)$$

⁵ Η εξάρτηση $\omega \propto M^{-1/2}$ είναι χαρακτηριστικό γνώρισμα των φωνονικών συχνοτήτων ω ενός κρυστάλλου με ιοντική μάζα M , όπως προκύπτει από τον τύπο (2.96). Επιπλέον, στους συνήθεις υπεραγωγούς ασθενούς σύζευξης έχουμε τυπικά ότι: $\omega_D/k_B \leq 500$ K και $gN(0) \leq \frac{1}{3}$. Επομένως, από την (14.53) έπεται ότι $T_c \leq 1.13 \times 500 \times \exp(-3) = 28.1$ K, ή γενικότερα,

$$T_c \leq 30 - 40 \text{ K}. \quad (14.54)$$

Η συνθήκη (14.54) ικανοποιείται στα τυπικά μέταλλα, όχι όμως και στους υπεραγωγούς υψηλού T_c .

η τιμή του οποίου είναι μια οικουμενική σταθερά, δηλ. ανεξάρτητη από όλες τις παραμέτρους της θεωρίας, και επομένως ίδια για όλα τα υλικά. Είναι αξιοσημείωτο ότι, παρά τις δραστικές προσεγγίσεις της θεωρίας, οι τιμές του αδιάστατου πηλίκου $2\Delta_0/(k_B T_c)$ που προκύπτουν από ανεξάρτητες πειραματικές μετρήσεις των Δ_0 και T_c , στους συνήθεις υπεραγωγούς ασθενούς σύζευξης, βρίσκονται σε καλή συμφωνία με την πρόβλεψη (14.55). Το γεγονός αυτό δείχνει την ορθότητα της βασικής φυσικής έννοιας της θεωρίας της υπεραγωγιμότητας, δηλ. της έννοιας του ζεύγους Cooper και της συνακόλουθης ύπαρξης μη μηδενικών ανώμαλων μέσων τιμών, $\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \neq 0$.

Με τη βοήθεια των παραπάνω αποτελεσμάτων, είναι δυνατό να απλουστεύσουμε τη γενική μορφή της εξίσωσης χάσματος (14.45)–(14.46) θεωρώντας το όριο ασθενούς σύζευξης, $gN(0) \ll 1$, και τη συνήθη περιοχή θερμοκρασιών, $k_B T \ll \omega_D$, όπου ικανοποιούνται οι συνθήκες

$$k_B T_c \ll \omega_D \ll \mu \quad \text{και} \quad \omega_D/\Delta(T) \gg 1. \quad (14.56)$$

Συγκεκριμένα, πραγματοποιώντας στην (14.46) την αλλαγή μεταβλητής $s = \xi/\Delta(T)$ και εκφράζοντας την υπερβολική εφαπτομένη (\tanh) με τη βοήθεια της εκθετικής συνάρτησης (\exp), έχουμε ισοδύναμα ότι

$$\frac{1}{gN(0)} = \int_0^{\omega_D/\Delta(T)} \frac{ds}{\sqrt{1+s^2}} - 2 \int_0^\infty \frac{ds}{\sqrt{1+s^2}} \frac{1}{\exp[\beta\Delta(T)\sqrt{1+s^2}] + 1}. \quad (14.57)$$

Σημειώνουμε ότι στο δεύτερο ολοκλήρωμα του δεξιού μέλους της (14.57) επεκτείναμε το πάνω όριο της ολοκλήρωσης στο άπειρο δεδομένου ότι: (α) θεωρούμε το όριο ασθενούς σύζευξης και την περιοχή θερμοκρασιών $T \leq T_c$ όπου ικανοποιούνται οι συνθήκες (14.56), και (β) το προκύπτον s -ολοκλήρωμα συγκλίνει. Με τη βοήθεια του αποτελέσματος (14.47) και υπολογίζοντας το πρώτο ολοκλήρωμα του δεξιού μέλους της (14.57) με τρόπο ανάλογο της (7.91), έχουμε ισοδύναμα ότι

$$\ln \left[\frac{\Delta(T)}{\Delta_0} \right] = -2 \int_0^\infty \frac{ds}{\sqrt{1+s^2}} \frac{1}{\exp[\beta\Delta(T)\sqrt{1+s^2}] + 1}. \quad (14.58)$$

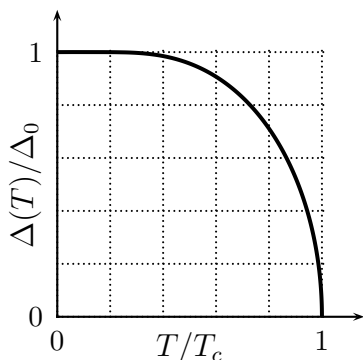
Αντιστοίχως, προσθέτοντας και αφαιρώντας την έκφραση (14.51) στο δεξιό μέλος της (14.45), έχουμε ισοδύναμα ότι

$$\frac{1}{gN(0)} = \ln \left(\frac{2e^\gamma \omega_D}{\pi k_B T} \right) + \frac{2}{\beta} \sum_n \int_0^\infty d\xi \left[\frac{1}{\omega_n^2 + \xi^2 + \Delta^2(T)} - \frac{1}{\omega_n^2 + \xi^2} \right]. \quad (14.59)$$

Σημειώνουμε ότι στο δεξιό μέλος της (14.59) εναλλάξαμε τη σειρά της άθροισης πάνω στις συχνότητες ω_n με την ολοκλήρωση πάνω στη μεταβλητή ξ και επεκτείναμε το πάνω όριο της ολοκλήρωσης στο άπειρο ($\omega_D \rightarrow \infty$) δεδομένου ότι: (α) θεωρούμε το όριο ασθενούς σύζευξης και την περιοχή θερμοκρασιών $T \leq T_c$ όπου ικανοποιούνται οι συνθήκες (14.56), και (β) το προκύπτον ω_n -άθροισμα συγκλίνει. Πραγματοποιώντας τώρα το ολοκλήρωμα πάνω στη μεταβλητή ξ , με τη βοήθεια του τύπου (A.34), και χρησιμοποιώντας τη συνθήκη (14.52) για τη θερμοκρασία μετάβασης T_c , η (14.59) γράφεται ισοδύναμα ως εξής

$$\ln\left(\frac{T}{T_c}\right) = \frac{\pi}{\beta} \sum_n \left[\frac{1}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2(T)}} - \frac{1}{|\omega_n|} \right]. \quad (14.60)$$

Οι ισοδύναμες μορφές της εξίσωσης χάσματος BCS (14.58) και (14.60) προσφέρονται για άμεσο αριθμητικό υπολογισμό της παραμέτρου $\Delta(T)$ και αναδεικνύουν, ενόψει της (14.55), το σημαντικό γεγονός ότι: στο όριο ασθενούς σύζευξης, το πηλίκο $\Delta(T)/\Delta_0$ είναι μια οικουμενική συνάρτηση της παραμέτρου T/T_c . Το αποτέλεσμα του αριθμητικού υπολογισμού τής εν λόγω συνάρτησης παρουσιάζεται στο Σχήμα 14.2 και βρίσκεται σε καλή συμφωνία με αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις σε υπεραγωγούς ασθενούς σύζευξης.



Σχήμα 14.2: Εξάρτηση της παραμέτρου χάσματος BCS, $\Delta(T)$, από τη θερμοκρασία T , σύμφωνα με την (14.60). Η τιμή του αδιάστατου πηλίκου $\Delta_0/(k_B T_c)$ προσδιορίζεται από την (14.55).

Στο υπόλοιπο αυτής της παραγράφου θα εξετάσουμε αναλυτικά την ασυμπτωτική συμπεριφορά της παραμέτρου χάσματος, $\Delta(T)$, στην περιοχή χαμηλών θερμοκρασιών καθώς και στην περιοχή κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης.

Για τον προσδιορισμό της συμπεριφοράς της παραμέτρου χάσματος στο όριο χαμηλών θερμοκρασιών ($T \ll T_c$), όπου $\beta\Delta(T) \gg 1$, ξεκινάμε από την εξίσωση χάσματος στη μορφή (14.58). Σε αυτήν την περίπτωση, από τον ορισμό (A.67)

της τροποποιημένης συνάρτησης Bessel $K_0(x)$ και το ασυμπτωτικό της ανάπτυγμα (A.68) για μεγάλες τιμές του ορίσματος, $x = \beta\Delta(T) \gg 1$, έχουμε διαδοχικά ότι

$$\begin{aligned} \ln \left[\frac{\Delta(T)}{\Delta_0} \right] &\approx -2 \int_0^\infty \frac{ds}{\sqrt{1+s^2}} \exp[-\beta\Delta(T)\sqrt{1+s^2}] \\ &= -2K_0[\beta\Delta(T)] \\ &\approx -\sqrt{\frac{2\pi k_B T}{\Delta_0}} e^{-\Delta_0/(k_B T)}. \end{aligned} \quad (14.61)$$

Αναπτύσσοντας με τη βοήθεια της (A.15) τον λογάριθμο του αριστερού μέλους της παραπάνω εξίσωσης σε δυνάμεις της μικρής παραμέτρου, $[\Delta(T)/\Delta_0] - 1$, έχουμε τελικά ότι, σε πρώτη προσέγγιση, η εξάρτηση της παραμέτρου χάσματος από τη θερμοκρασία δίνεται από τη σχέση

$$\Delta(T) = \Delta_0 - \sqrt{2\pi\Delta_0 k_B T} e^{-\Delta_0/(k_B T)}, \quad \text{με } T \ll T_c. \quad (14.62)$$

Για τον προσδιορισμό της συμπεριφοράς της παραμέτρου χάσματος κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης T_c είναι πιο εύχρηστο να ξεκινήσουμε από την εξίσωση χάσματος στη μορφή (14.60). Πράγματι, κοντά στο T_c η τιμή της παραμέτρου χάσματος είναι μικρή και επομένως μπορούμε να αναπτύξουμε με τη βοήθεια της (A.14) την τετραγωνική ρίζα του δεξιού μέλους της εξίσωσης (14.60) σε δυνάμεις του $\Delta(T)$

$$\begin{aligned} \ln \left(\frac{T}{T_c} \right) &= \frac{\pi}{\beta} \sum_n \left[-\frac{\Delta^2(T)}{2|\omega_n|^3} + \frac{3\Delta^4(T)}{8|\omega_n|^5} - \dots \right], \\ &= -\frac{\Delta^2(T)}{(\pi k_B T)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^3} + \frac{3}{4} \frac{\Delta^4(T)}{(\pi k_B T)^4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^5} - \dots \end{aligned} \quad (14.63)$$

Με τη βοήθεια της ταυτότητας (A.54), που ικανοποιεί η ζήτα συνάρτηση του Riemann, $\zeta(z)$, και λαμβάνοντας υπ' όψιν την (14.55), συμπεραίνουμε από την (14.63) ότι

$$\ln \left(\frac{T}{T_c} \right) = -\frac{7\zeta(3)}{8} \frac{\Delta^2(T)}{(\pi k_B T_c)^2} + \mathcal{O} \left(\frac{\Delta(T)}{k_B T_c} \right)^4. \quad (14.64)$$

Αναπτύσσοντας με τη βοήθεια της (A.15) τον λογάριθμο του αριστερού μέλους της παραπάνω εξίσωσης σε δυνάμεις της μικρής παραμέτρου $(T/T_c) - 1$, έχουμε τελικά

ότι, σε πρώτη προσέγγιση, η εξάρτηση της παραμέτρου χάσματος από τη θερμοκρασία δίνεται από τη σχέση

$$\begin{aligned} \Delta(T) &= \pi k_B T_c \sqrt{\frac{8}{7\zeta(3)}} \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}} \\ &\approx 3.06 k_B T_c \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}, \quad \text{με } 0 \leq T_c - T \ll T_c, \end{aligned} \quad (14.65)$$

όπου για την $\zeta(3)$ χρησιμοποιήσαμε την αριθμητική τιμή (A.53).

Από την (14.65) συμπεραίνουμε ότι, όταν η θερμοκρασία T τείνει στην κρίσιμη τιμή T_c , η παράμετρος χάσματος τείνει στο μηδέν με συνεχή τρόπο, $\Delta(T) \propto (T_c - T)^\beta$, όπου ο λεγόμενος κρίσιμος εκθέτης (critical exponent) β έχει την τιμή: $\beta = 1/2$. Το αποτέλεσμα αυτό βρίσκεται σε πλήρη συμφωνία με τις προβλέψεις της φαινομενολογικής θεωρίας μέσου πεδίου του Landau για μεταβολές φάσης “δευτέρου είδους”, όπου τον ρόλο μιας χωρικά ομογενούς “παραμέτρου τάξης” τον παίζει η παράμετρος χάσματος $\Delta(T)$.

14.4 Θερμοδυναμικές ιδιότητες

14.4.1 Μεγάλο δυναμικό και ελεύθερη ενέργεια

Στη συγκριτική μελέτη των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων της υπεραγωγικής (s) και της κανονικής (n) φάσης, σε πεπερασμένες θερμοκρασίες $T \leq T_c$, πρέπει να παρατηρήσουμε, σε αναλογία με την παράγραφο 7.6.4, ότι: για μια δοσμένη τιμή του χημικού δυναμικού μ , ο αριθμός σωματιδίων στις δύο φάσεις παραμένει αμετάβλητος, δηλ. $\langle \hat{N} \rangle_s = \langle \hat{N} \rangle_n$.⁶ Το γεγονός αυτό συνεπάγεται ισοδύναμα ότι: για έναν δοσμένο αριθ-

⁶Πράγματι, από το γενικό αποτέλεσμα (14.39), τη ρητή μορφή της συνάρτησης χάσματος (14.44), και την (7.90), έπεται διαδοχικά ότι

$$\begin{aligned} &\langle \hat{N} \rangle_s - \langle \hat{N} \rangle_n \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \theta(\omega_D - |\xi_{\mathbf{k}}|) \xi_{\mathbf{k}} \left[\frac{\tanh(\beta|\xi_{\mathbf{k}}|/2)}{|\xi_{\mathbf{k}}|} - \frac{\tanh(\beta E_{\mathbf{k}}/2)}{E_{\mathbf{k}}} \right] \\ &\approx VN(0) \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \xi \left[\frac{\tanh(\beta|\xi|/2)}{|\xi|} - \frac{\tanh\left(\beta\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}/2\right)}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}} \right] = 0. \end{aligned} \quad (14.66)$$

Η τελευταία ισότητα οφείλεται στο γεγονός ότι η ολοκληρωτέα ποσότητα είναι περιττή ως προς τη μεταβλητή ξ .