

Supraconductivité : un résumé des théories

August 22, 2013

L'objectif de ce document est de présenter rapidement les théories les plus canoniques décrivant la supraconductivité conventionnelle.

Théorie de London

Hypothèse Un matériau est dit *supraconducteur* si et seulement si il est conducteur parfait et vérifie l'équation dite de London $\vec{\text{rot}}(\vec{j}) = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \vec{B}$

Objectifs Estimer la pénétration du champ dans le matériau ; montrer que le champ magnétique est expulsé.

Cadre théorique Mécanique classique, modèle de Drude

Point clé Différence entre conducteur normal / conducteur parfait / super conducteur.

Approche thermodynamique

Hypothèse Un matériau *supraconducteur* se caractérise par un diamagnétisme parfait : il rejette les champs magnétiques

Objectifs Montrer l'existence d'une transition d'état normal / supra en fonction des paramètres extérieurs (température, champ magnétique)

Cadre théorique Potentiels thermodynamiques, premier et second principe

Point clé Cette approche prédit un saut de capacité thermique et relie ce saut à des grandeurs mesurables expérimentalement.

Théorie de Ginzburg Landau (à développer)

Hypothèse Il existe une transition de phase normale / supra caractérisée par un paramètre d'ordre Δ et on peut exprimer le potentiel thermodynamique sous la forme $F =$ grosse expression moche

Objectif Prédire le comportement des supraconducteurs ie établir des équations régissant leurs comportements (équation de Ginzburg Landau)

Utiliser ces équations pour prédire des effets mesurables (effet Josephson)

Cadre théorique Thermodynamique quantique

Points clés

Théorie Bardeen-Cooper-Schrieffer

Hypothèse Expression du Hamiltonien microscopique

Objectif Modéliser les propriétés des supraconducteurs à partir d'un modèle microscopique

Cadre théorique Mécanique quantique de N particules en interactions

Points clés

- Prédiction d'un gap supraconducteur
- Estimer l'énergie de condensation, ie la différence de potentiel entre phase normale et phase supra (lien avec l'approche thermo)
- Prédiction d'une relation extrêmement importante entre des grandeurs caractéristiques des supraconducteurs ($\Delta_{T=0} = \frac{\pi}{e\gamma} k_B T_c \simeq 1.76 k_B T_c$). Cette relation ne dépend *d'aucun paramètre libre de la théorie !!*

1 Equation de London dans une lame mince

On considère un conducteur métallique doté d'une densité d'électrons n , infini suivant x et y et compris entre $z = -d$ et $z = d$. Le reste de l'espace est vide. Un champ extérieur impose $E_0 \cos \omega t \vec{e}_x$ aux interfaces $z = -d$ et $z = +d$. On suppose que ce champ engendre dans le métal un champ électromagnétique oscillant à la pulsation ω et on notera $\vec{E}(z, t) = \text{Re}(\underline{E}(\omega, z)e^{i\omega t})\vec{u}_x$.

1.1 Champ dans un conducteur réel

Dans un métal réel, la conductivité est finie et on a

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -e\vec{E} - \frac{m}{\tau}\vec{v}$$

$$\underline{j}(\omega, z) = \sigma(\omega)\underline{E}(\omega, z)$$

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m} \frac{1}{1+j\omega\tau} = \epsilon_0\omega_p^2\tau \frac{1}{1+j\omega\tau} = \frac{\tau}{\mu_0\lambda_L^2} \frac{1}{1+j\omega\tau}$$

Par ailleurs, \vec{rot} (Maxwell Ampère) donne la relation

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial z^2}\underline{B}(z) &= \left(i\mu_0\omega \frac{\omega_p^2\tau}{1+j\omega\tau} - \frac{\omega^2}{c^2} \right) \underline{B}(z) \\ &= - \left(\frac{\omega^2}{c^2} - \frac{\omega_p^2}{c^2} \frac{1}{1+j\omega\tau} \right) \underline{B}(z) \end{aligned}$$

A basse fréquence, on obtient l'équivalent

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\underline{B}(z) \simeq -i\mu_0\sigma_0\omega\underline{B}(z)$$

d'où on déduit la relation

$$\underline{B}(z) = B_0 \exp\left(-\frac{z}{\delta}\right) \cos\left(\omega t - \frac{z}{\delta}\right)$$

$$\delta = \sqrt{\frac{2}{\mu_0\sigma_0\omega}} = \sqrt{\frac{2\lambda_L^2}{\tau\omega}}$$

On a alors

$$\vec{B}(z, t) = B_0 \left(\exp\left(-\frac{z+d}{\delta}\right) \cos\left(\omega t - \frac{z+d}{\delta}\right) + \exp\left(\frac{z-d}{\delta}\right) \cos\left(\omega t + \frac{z-d}{\delta}\right) \right) \vec{e}_y$$

Analyse

Les variations du champ sont atténuées exponentiellement avec la longueur de peau δ .

Cependant, pour $\omega \rightarrow 0$, la longueur de peau diverge ; un champ statique peut donc pénétrer dans le milieu.

1.2 Champ dans un conducteur parfait

Dans un métal parfait, on néglige l'amortissement du courant ($\tau \rightarrow +\infty$) et on a

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{j}}{dt} &= \frac{ne^2}{m}\vec{E} = \frac{1}{\mu_0\lambda_L^2}\vec{E} \\ \Rightarrow \vec{rot}\left(\frac{\partial}{\partial t}\vec{j}\right) &= -\frac{1}{\mu_0\lambda_L^2}\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} \quad (\text{Maxwell Faraday}) \\ \Rightarrow \left(\Delta - \frac{1}{\lambda_L^2}\right)\frac{\partial\vec{B}}{\partial t} &= 0 \quad (\text{Maxwell Ampère}) \end{aligned}$$

On a alors

$$\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}(z, t) = \frac{\partial\vec{B}}{\partial t}(-d, t) \exp\left(-\frac{z+d}{\lambda_L}\right) + \frac{\partial\vec{B}}{\partial t}(d, t) \exp\left(\frac{z-d}{\lambda_L}\right)$$

Analyse

Ce sont ici les variations temporelle du champ magnétique qui sont atténuées exponentiellement. Ainsi, le champ dans le milieu est constant (à partir d'une certaine profondeur), indépendamment du champ extérieur appliqué.

1.3 Champ dans un supraconducteur

Dans un supraconducteur, on remplace la relation $\overrightarrow{rot} \left(\frac{\partial \overrightarrow{j}}{\partial t} \right) = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \frac{\partial \overrightarrow{B}}{\partial t}$ par la relation de London

$$\overrightarrow{rot} \left(\overrightarrow{j} \right) = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \overrightarrow{B}$$

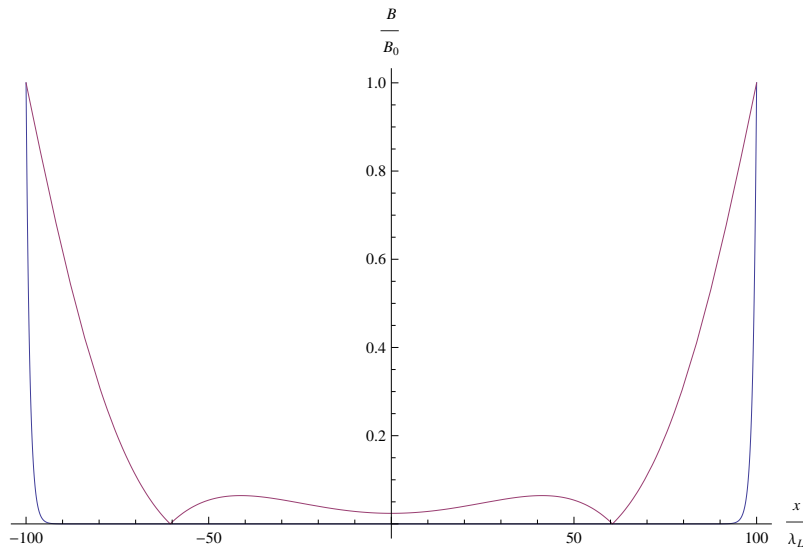
Avec le même calcul, on obtient

$$\left(\Delta - \frac{1}{\lambda_L^2} \right) \overrightarrow{B} = 0$$

On en déduit que le champ est de la forme

$$\overrightarrow{B} = \frac{ch\left(\frac{z}{\lambda_L}\right)}{ch\left(\frac{d}{\lambda_L}\right)} \overrightarrow{B}_0$$

Pour $d = 100 \lambda_L$ et $\delta = 25 \lambda_L$, on trouve la forme :



Analyse

Le champ magnétique, quelque soit sa fréquence et même s'il est statique, est expulsé hors du milieu.

1.4 Cycles magnétiques

2 Approche thermodynamique

2.1 Première approche : les supra de type 1

On s'intéresse à la transition de phase supraconducteur - normal d'un métal paramagnétique à pression constante. En présence d'un champ extérieur \overrightarrow{B} , un matériau paramagnétique acquiert un moment magnétique volumique $\overrightarrow{M} = \frac{\chi}{\mu_0} \overrightarrow{B}_0$, où χ est la susceptibilité magnétique du matériau, supposée indépendante de la température. Dans la phase supraconductrice, $\chi = -1$, dans la phase normale, $\chi \simeq 0$.

2.1.1 Potentiel thermodynamique

Le travail volumique infinitésimal à fournir à une unité de volume de métal pour augmenter son moment magnétique volumique de $d\overrightarrow{M}$ vaut $\delta w_{mag} = \overrightarrow{B} \cdot d\overrightarrow{M}$. On a donc $du = \delta w_{mag} + \delta q = \overrightarrow{B} \cdot d\overrightarrow{M} + \delta q$ (premier principe) et $ds = \frac{\delta q}{T_{ext}} + \delta s_c \geq \frac{\delta q}{T_{ext}}$ (second principe) donc, pour une transformation monomagnétique et monotherme,

$$0 \geq du - \overrightarrow{B_{ext}} \cdot d\overrightarrow{\mathcal{M}} - T_{ext} ds = d\left(u - \overrightarrow{B_{ext}} \cdot \overrightarrow{\mathcal{M}} - T_{ext} s\right) = dg^*.$$

On définit la grandeur volumique $g = u - \overrightarrow{B_{ext}} \cdot \overrightarrow{\mathcal{M}} - T_{ext} s$. Sur toute transformation isotherme et isomagnétique, $\Delta g = \Delta g^* \leq 0$. On définit donc g comme potentiel thermodynamique et on a

$$\begin{aligned} dg &= du - BdM - MdB - Tds - sdT \\ &= -MdB - sdT \\ &= -sdT - d\left(\frac{\chi}{2\mu_0} B^2\right) \end{aligned}$$

On en déduit l'expression des enthalpies libres dans les phase supra et normales :

Phase supra : $\chi = -1$

Phase normale : $\chi = 0$

$$g_s(T, B) = g_s(T, 0) + \frac{1}{2\mu_0} B^2$$

$$g_n(T, B) = g_n(T, 0)$$

2.1.2 Champ critique

A toute température T , il existe nécessairement un champ $B_c(T)$ critique tel que le matériau devient normal car l'enthalpie libre de la phase supra est une fonction continue et croissante de B et dépassera donc nécessairement la valeur de l'enthalpie libre de la phase normale si B est assez grand (théorème des valeurs intermédiaires). On a alors, par définition

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad g_s(T, B_c(T)) &= g_n(T, B_c(T)) = g_n(T, 0) \\ g_s(T, B) &= g_s(T, B_c(T)) - \frac{1}{2\mu_0} B_c^2(T) + \frac{1}{2\mu_0} B^2 \\ &= g_n(T, 0) - \frac{1}{2\mu_0} (B_c^2(T) - B^2) \end{aligned}$$

Expérimentalement, on trouve que le champ critique est décrit par une expression de la forme

$$\forall T < T_c, B_c(T) = B_c(0) \left(1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right)$$

2.1.3 Entropie et formule de Clapeyron

En suivant la ligne de changement de phase, on a

$$g_n(T, B_c) = g_s(T, B_c)$$

$$g_n(T + dT, B_c + dB_c) = g_s(T + dT, B_c + dB_c)$$

$$\begin{aligned} g_n(T, B_c) + \left(\frac{\partial g_n}{\partial T}\right)_B dT + \left(\frac{\partial g_n}{\partial B}\right)_T dB_c &= g_s(T, B_c) + \left(\frac{\partial g_s}{\partial T}\right)_B dT + \left(\frac{\partial g_s}{\partial B}\right)_T dB_c \\ \left(\frac{\partial g_n}{\partial T}\right)_B (T, B_c) dT &= \left(\frac{\partial g_s}{\partial T}\right)_B (T, B_c) dT + \left(\frac{\partial g_s}{\partial B}\right)_T (T, B_c) dB_c \\ (s_n - s_s) dT &= -\frac{1}{\mu_0} B_c dB_c \\ s_n - s_s &= -\frac{d}{dT} \left(\frac{1}{2\mu_0} B_c^2\right) \end{aligned}$$

Remarque Comme le champ critique est une fonction décroissante de la température, l'entropie de la phase supra est toujours inférieure à celle de la phase normale, ce qui traduit la présence d'un ordre supplémentaire.

Par ailleurs, comme $s_n - s_s = TL_{n \rightarrow s}$, on trouve l'enthalpie de changement d'état $L_{n \rightarrow s}$:

$$L_{s \rightarrow n} = -T \frac{d}{dT} \left(\frac{B_c^2}{2\mu_0}\right)$$

2.1.4 Capacité thermique

La capacité thermique magnétique c_B du système est définie par la relation

$$c_B = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_B.$$

où l'enthalpie volumique h est définie par $h = u - BM$.

Comme $dh = du - d(BM) = Tds + BdM - BdM - MdB$, donc $c_B = T \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_B$. Comme par ailleurs $s = - \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_B$, on retrouve la relation $c_B = -T \left(\frac{\partial^2 g}{\partial T^2} \right)_B$. On a donc à la température T et au champ B ,

• Dans la phase normale

$$\begin{aligned} c_{B,N} &= -T \left(\frac{\partial^2 g_n(T,B)}{\partial T^2} \right)_B \\ &= -T \left(\frac{\partial^2 g_n(T,0)}{\partial T^2} \right)_B \end{aligned}$$

• Dans la phase supra

$$\begin{aligned} c_{B,S} &= -T \left(\frac{\partial^2 g_s(T,B)}{\partial T^2} \right)_B \\ &= -T \left(\frac{\partial^2 g_n(T,0)}{\partial T^2} \right)_B + \frac{T}{2\mu_0} \left(\frac{\partial^2 (B_c^2(T))}{\partial T^2} \right)_B \end{aligned}$$

Il y a donc une différence de capacité thermique entre la phase normale et la phase supra. En admettant la forme du champ critique donné précédemment, le saut de capacité thermique à la température critique est donné par

$$\begin{aligned} c_{B,S} - c_{B,N} &= \frac{T_c}{2\mu_0} \left(\frac{\partial^2 (B_c^2(T))}{\partial T^2} \right)_B \\ &= 4 \frac{B_c(0)}{T_c} \end{aligned}$$

2.2 Longueur de cohérence : les supra de type 2

2.2.1 L'existence d'une interface normale / supra ; longueurs caractéristiques

Dans la description de London, on a vu que le champ dans une lame mince supraconductrice s'écrit sous la forme (voir 1.3)

$$B = \frac{ch\left(\frac{z}{\lambda_L}\right)}{ch\left(\frac{d}{\lambda_L}\right)} B_0$$

Ce champ est constitué de deux contributions : le champ extérieur B_0 constant et uniforme l'aimantation du matériau $M(x)$; on a donc $B(x) = B_0 + \mu_0 M(x)$. L'aimantation moyenne est alors donnée par

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{2d} \int_{-d}^d dx M(x) \\ &= \frac{1}{2d\mu_0} \int_{-d}^d dx B(x) - B_0 \\ &= \frac{B_0}{\mu_0} \left(\frac{\lambda_L}{d} \tanh\left(\frac{d}{\lambda_L}\right) - 1 \right) \end{aligned}$$

Lorsque la profondeur du matériau est grande devant la longueur de London, on retrouve un diamagnétisme parfait.

Avec ce calcul plus exact, on peut recalculer la différence d'enthalpie libre entre la phase normale et la phase supra (comme dans 2.1.1). Le potentiel de la phase normale est inchangée (on a toujours $\chi = 0$). Le potentiel de la phase supra est donnée par

$$\begin{aligned} dg &= -MdB - sdT \\ \Rightarrow g_s(T, B) &= g_s(T, 0) - \int_0^B dB \frac{B}{\mu_0} \left(\frac{\lambda_L}{d} \tanh\left(\frac{d}{\lambda_L}\right) - 1 \right) \\ &= g_s(T, 0) + \frac{B^2}{2\mu_0} \left(1 - \frac{\lambda_L}{d} \tanh\left(\frac{d}{\lambda_L}\right) \right) \end{aligned}$$

Dans l'approche précédente, le champ critique était défini par $g_s(T, 0) + \frac{B_c^2}{2\mu_0} = g_s(T, B_c(T)) = g_n(T, B_c(T)) = g_n(T, 0)$. Avec cette définition, on peut définir le champ critique d'un supraconducteur de London $B_c'(T)$:

$$\begin{aligned} g_s(T, B) &= g_s(T, B_c(T)) - \frac{B_c^2}{2\mu_0} + \frac{B^2}{2\mu_0} \left(1 - \frac{\lambda_L}{d} \tanh\left(\frac{d}{\lambda_L}\right) \right) \\ \Rightarrow B_c'^2(T) &= \frac{B_c^2(T)}{1 - \frac{\lambda_L}{d} \tanh\left(\frac{d}{\lambda_L}\right)} \xrightarrow{d \gg \lambda_L} 3 \frac{\lambda_L^2}{d^2} B_c^2(T) \end{aligned}$$

Conclusions

1. Si le matériau est mince, il supporte un champ extérieur beaucoup plus important que s'il est épais.
2. Si le matériau est épais, d'épaisseur $2d \gg \lambda_L$, une alterance de couches supra d'épaisseur $2a \simeq \lambda$ et de couches normales d'épaisseur $2b \ll \lambda$ permet de supporter des champs plus intenses. On peut donc s'attendre à voir apparaître des interfaces normales / supra dans les matériaux pour réduire l'augmentation d'énergie libre due à l'expulsion du champ magnétique.
 - Tous les matériaux ne se comportent pas ainsi (l'effet Meissner disparaît brutalement dans les supra de type I). Il doit donc exister un coup énergétique qui s'oppose à la formation d'interfaces mixtes et que nous n'avons pas pris en compte : nous avons considéré que les interfaces étaient abruptes ; elles s'installent en réalité sur une certaine distance.

Longueurs caractéristiques

On est donc amenés à considérer deux longueurs caractéristiques, dont le rapport va déterminer le comportement du matériaux (apparition d'interfaces ou non)

<p><i>Longueur de London λ_L</i></p> <p>traduit la profondeur de pénétration du champ</p> <p>ie passage de B_0 à $B = 0$</p> <p>Gain d'énergie libre à l'interface par unité d'aire :</p> $\lambda_L \frac{B_0^2}{2\mu_0}$	<p><i>Longueur de cohérence ξ</i></p> <p>traduit la longueur d'instauration de la phase supra</p> <p>ie passage de $n_s = 0$ à n_s</p> <p>Perte d'énergie libre à l'interface par unité d'aire :</p> $\xi \frac{B_c^2}{2\mu_0}$
-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

3 Théorie de Ginzburg- Landau

à développer

4 Théorie BCS à $T = 0$

4.1 Hamiltonien modèle

On considère deux électrons de spin $\alpha = \pm \frac{1}{2}$ et $\beta = \pm \frac{1}{2}$ en interaction, l'interaction étant supposée indépendante du spin et conservant l'impulsion \vec{q} du centre de masse du système. Le hamiltonien prend donc la forme $H = H_{\text{cin}} + H_{\text{int}}$ avec $H_{\text{cin}} = \frac{\hbar^2 q^2}{4m_e} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_e}$.

De manière générale, on peut écrire le hamiltonien d'interaction entre deux électrons comme

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \alpha, \beta} V_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} a_{\vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}, \alpha}^\dagger a_{-\vec{k}' + \frac{\vec{q}}{2}, \beta}^\dagger a_{\vec{k}, \alpha} a_{-\vec{k}' + \frac{\vec{q}}{2}, \beta}$$

On s'intéresse à la limite de basse énergie, ce qui permet de faire un certain nombre d'approximations

- Dans la limite de basse énergie, on néglige l'impulsion du centre de masse et on prend $q = 0$.

- On peut décomposer les éléments de matrices en harmoniques sphériques $V_{\vec{k},\vec{k}'} = \sum_{l \in \mathbb{N}} f_l P_l \left(\cos \left(\theta_{\vec{k},\vec{k}'} \right) \right)$, où $\{P_l\}$ sont les polynomes de Legendre. Dans la limite de basse énergie, seule la contribution de moment cinétique nul $l = 0$ contribue (collisions en ondes s). Par ailleurs, $P_0(x) = \text{cste}$ et on peut donc prendre

$$\begin{aligned} H_{int} &= -\frac{V}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}',\alpha,\beta} a_{\vec{k}',\alpha}^\dagger a_{-\vec{k}',\beta}^\dagger a_{\vec{k},\alpha} a_{-\vec{k},\beta} \\ &= -\frac{V}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left(\left(\sum_{\vec{k}'} a_{\vec{k}',\alpha}^\dagger a_{-\vec{k}',\beta}^\dagger \right) \left(\sum_{\vec{k}} a_{\vec{k},\alpha} a_{-\vec{k},\beta} \right) \right) \end{aligned}$$

- Les termes de même spins $\alpha = \beta$ sont nuls car

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k},\alpha}^\dagger a_{-\vec{k},\alpha} &= -\sum_{\vec{k}} a_{-\vec{k},\alpha} a_{\vec{k},\alpha} \quad \text{par anticommutation des opérateurs fermioniques} \\ &= -\sum_{\vec{k}} a_{\vec{k},\alpha} a_{-\vec{k},\alpha} \quad \text{par réindexation de la somme} \end{aligned}$$

Le hamiltonien d'interaction se réécrit finalement sous la forme

$$H_{int} = -V \sum_{\vec{k},\vec{k}'} a_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger a_{\vec{k},\uparrow} a_{-\vec{k},\downarrow}$$

Le hamiltonien total prend donc la forme

$$H_{tot} = \sum_{\vec{k},\alpha} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} a_{\vec{k},\alpha}^\dagger a_{\vec{k},\alpha} - V \sum_{\vec{k},\vec{k}'} a_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger a_{\vec{k},\uparrow} a_{-\vec{k},\downarrow}$$

Par la suite, on passera dans l'ensemble grand canonique et on définit

$$H_{BCS} = H_{tot} - \mu \hat{N} = \sum_{\vec{k},\alpha} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \mu \right) a_{\vec{k},\alpha}^\dagger a_{\vec{k},\alpha} - V \sum_{\vec{k},\vec{k}'} a_{\vec{k}',\uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}',\downarrow}^\dagger a_{\vec{k},\uparrow} a_{-\vec{k},\downarrow}$$

4.2 Fonction d'onde BCS

On cherche à déterminer la fonction d'onde à N électrons $\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ qui minimise le hamiltonien H_{tot} .

On décide de la chercher sous la forme d'un "condensat" de paires d'électrons ie comme plein de paires d'électrons toutes dans le même état ϕ . En tenant compte de l'antisymétrisation de la fonction d'onde, on écrit alors

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \text{AS} \{ \phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \phi(\vec{r}_3 - \vec{r}_4) \dots \phi(\vec{r}_{N-1} - \vec{r}_N) \}$$

Comme c'est super pas pratique, on écrit plutôt les états correspondants en faisant agir des opérateurs de création sur le vide d'excitations (ie la mer de Fermi) $|0\rangle$:

$$\left(\int \prod_{i=1}^N d\vec{r}_i \phi(\vec{r}_{N-1} - \vec{r}_N) \psi^\dagger(\vec{r}_{N-1}) \psi^\dagger(\vec{r}_N) \dots \phi(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \psi^\dagger(\vec{r}_1) \psi^\dagger(\vec{r}_2) \right) |0\rangle$$

Dans l'espace réciproque, cette fonction s'écrit

$$|\Psi\rangle_N = \left(\sum_{\vec{k},\alpha,\beta} \phi_k a_{\vec{k},\alpha}^\dagger a_{-\vec{k},\beta}^\dagger \right)^{N/2} |0\rangle$$

Dans ce produit, tous les termes de la forme $(a)^\dagger$ et $(a)^\dagger$ sont nuls. Pour obtenir une expression plus simple, on se place dans l'ensemble grand canonique et on définit

$$\begin{aligned}
|\Psi\rangle &= \left(\sum_{N \in 2\mathbb{N}} \frac{1}{\left(\frac{N}{2}\right)!} |\Psi\rangle_N \right) |0\rangle \\
&= \left(\sum_{N \in 2\mathbb{N}} \frac{1}{\left(\frac{N}{2}\right)!} \left(\sum_{\vec{k}, \alpha, \beta} \phi_k a_{\vec{k}, \alpha}^\dagger a_{-\vec{k}, \beta}^\dagger \right)^{N/2} \right) |0\rangle \\
&= \left(\prod_{\vec{k}, \alpha, \beta} \exp\left(\phi_k a_{\vec{k}, \alpha}^\dagger a_{-\vec{k}, \beta}^\dagger\right) \right) |0\rangle \\
&\quad \text{car } a_{\vec{k}, \alpha}^\dagger a_{-\vec{k}, \beta}^\dagger \text{ et } a_{\vec{k}, \alpha}^\dagger a_{-\vec{k}, \beta}^\dagger \text{ commutent} \\
&= \left(\prod_{\vec{k}, \alpha, \beta} \left(1 + \phi_k a_{\vec{k}, \alpha}^\dagger a_{-\vec{k}, \beta}^\dagger\right) \right) |0\rangle \\
&\quad \text{car toutes les puissances } \geq 2 \text{ sont nulles} \\
|\psi_{\text{BCS}}\rangle &= \prod_{\vec{k}, \alpha, \beta} \left(u_k + v_k a_{\vec{k}, \alpha}^\dagger a_{-\vec{k}, \beta}^\dagger\right) |0\rangle \\
&= \prod_{\vec{k}} \left(u_k + v_k a_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger\right) |0\rangle \\
&\quad \text{avec } |u_k|^2 + |v_k|^2 = 1, \text{ après renormalisation}
\end{aligned}$$

Interprétation

- $|u_k|^2$ donne la probabilité de n'avoir aucun électron avec les impulsions $\pm \vec{k}$; $|v_k|^2$ donne la probabilité d'avoir un électron avec l'impulsion \vec{k} et un autre avec l'impulsion $-\vec{k}$. Aucune autre configuration n'est possible.
- On peut choisir la phase d'une d'un de ces deux coefficients. On choisira (arbitrairement) de prendre $u_k \in \mathbb{R}$.

On détermine les coefficients u_k et v_k en minimisant le grand potentiel $E - \mu N = \langle \psi_{\text{BCS}} | H_{\text{BCS}} | \psi_{\text{BCS}} \rangle$.

Expression de l'énergie cinétique

$$E_{\text{cin}} = \langle \psi_{\text{BCS}} | \sum_{\vec{k}} \mathcal{E}_k a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} | \psi_{\text{BCS}} \rangle = \sum_{\vec{k}} |v_k|^2 2\mathcal{E}_k,$$

avec $\mathcal{E}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (chacun des deux électrons d'une paire porte la même énergie cinétique ; l'énergie cinétique totale est la somme des deux.)

Expression de l'énergie d'interaction

On cherche à estimer l'élément de matrice

$$\begin{aligned}
&\langle \psi_{\text{BCS}} | H_{\text{int}} | \psi_{\text{BCS}} \rangle = \\
&-V \sum_{\vec{p}, \vec{q}} \langle 0 | \prod_{\vec{k}'} \left(u_{k'} + v_{k'}^* a_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}', \downarrow}^\dagger\right) \left(a_{\vec{p}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{p}, \downarrow}^\dagger a_{\vec{q}, \uparrow} a_{-\vec{q}, \downarrow}\right) \prod_{\vec{k}} \left(u_k + v_k a_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger\right) |0\rangle,
\end{aligned}$$

dans lequel beaucoup de termes sont nuls.

- Si on fait agir le terme d'interaction $a_{\vec{p}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{p}, \downarrow}^\dagger a_{\vec{q}, \uparrow} a_{-\vec{q}, \downarrow}$ sur un terme de la forme $\left(u_k + v_k a_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger\right)$ avec $\vec{k} \neq \vec{p}$ et $\vec{k} \neq \vec{q}$, les paires d'opérateurs fermioniques commutent. On peut donc faire passer les opérateurs $\left(u_k + v_k a_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger\right)$ à droite du terme d'interaction et les faire commuter avec les termes $\left(u_{k'} + v_{k'}^* a_{\vec{k}', \uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}', \downarrow}^\dagger\right)$ sauf pour le terme $\left(u_k + v_k^* a_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger\right)$. Le terme $\left(u_k + v_k a_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger\right) \left(u_k + v_k^* a_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger\right)$ donne un facteur $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$ devant l'ensemble du terme.
- On regarde donc les termes de la forme

$$\begin{aligned}
&\left(a_{\vec{p}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{p}, \downarrow}^\dagger a_{\vec{q}, \uparrow} a_{-\vec{q}, \downarrow}\right) \left(u_p + v_p a_{\vec{p}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{p}, \downarrow}^\dagger\right) \left(u_q + v_q a_{\vec{q}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{q}, \downarrow}^\dagger\right) |0\rangle \\
&= u_p v_q \left(a_{\vec{p}, \uparrow}^\dagger a_{-\vec{p}, \downarrow}^\dagger a_{\vec{q}, \uparrow} a_{-\vec{q}, \downarrow}\right) |\vec{q}, \uparrow; -\vec{q}, \downarrow\rangle \\
&= u_p v_q |\vec{p}, \uparrow; -\vec{p}, \downarrow\rangle
\end{aligned}$$

- Il ne reste qu'à projeter ce terme sur les éléments du bra $\langle \psi_{BCS} |$ qui n'ont pas déjà été utilisé dans la première étape du calcul (ie pour $\vec{k} \neq \vec{p}$ et $\vec{k} \neq \vec{q}$)

$$\begin{aligned} & \langle 0 | (u_p + v_p^* a_{\vec{p}, \uparrow} a_{-\vec{p}, \downarrow}) (u_q + v_q^* a_{\vec{q}, \uparrow} a_{-\vec{q}, \downarrow}) u_p v_q | \vec{p}, \uparrow; -\vec{p}, \downarrow \rangle \\ &= u_p v_q u_q \langle 0 | (u_p + v_p^* a_{\vec{p}, \uparrow} a_{-\vec{p}, \downarrow}) | \vec{q}, \uparrow; -\vec{q}, \downarrow \rangle \\ &= u_p v_q u_q v_p^* \end{aligned}$$

- On trouve finalement

$$E_{int} = -V \sum_{\vec{p}, \vec{q}} u_p u_q v_q v_p^*$$

Expression du nombre de particules

$$N = \langle \psi_{BCS} | \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} | \psi_{BCS} \rangle = 2 \sum_{\vec{k}} |v_k|^2$$

Minimisation du potentiel

On minimise le potentiel en annulant sa variation au premier ordre en fonction des variations des $\{u_k, \mathcal{R}(v_k), \mathcal{I}(v_k)\} \Leftrightarrow \{u_k, v_k, v_k^*\}$.

$$\begin{aligned} E - \mu N &= \sum_{\vec{k}} 2(\mathcal{E}_k - \mu) |v_k|^2 - V \sum_{\vec{p}, \vec{q}} u_p u_q v_q v_p^* \\ \Rightarrow \delta(E - \mu N) &= \sum_{\vec{k}} 2(\mathcal{E}_k - \mu) (v_k \delta v_k^* + v_k^* \delta v_k) - V \sum_{\vec{p}, \vec{q}} (u_p v_p^* \delta(u_q v_q) + u_q v_q \delta(u_p v_p^*)) \end{aligned}$$

On a par ailleurs

$$\begin{aligned} |u_k|^2 + |v_k|^2 = 1 &\Rightarrow 2u_k \delta u_k + v_k \delta v_k^* + v_k^* \delta v_k = 0 \\ &\Rightarrow \delta u_k = -\frac{1}{2u_k} (v_k \delta v_k^* + v_k^* \delta v_k) \end{aligned}$$

et en définissant $\Delta = V \sum_q u_q v_q$ (on peut prendre $\Delta \in \mathbb{R}^+$ en changeant $|\psi_{BCS}\rangle$ en $e^{i\varphi} |\psi_{BCS}\rangle$), on écrit

$$\begin{aligned} & -V \sum_{\vec{p}, \vec{q}} (u_p v_p^* \delta(u_q v_q) + u_q v_q \delta(u_p v_p^*)) \\ &= -V \sum_{\vec{p}, \vec{k}} u_p v_p^* \delta(u_k v_k) - V \sum_{\vec{k}, \vec{q}} u_q v_q \delta(u_k v_k^*) \\ &= -V \sum_{\vec{k}} \left(\sum_{\vec{p}} u_p v_p^* \delta(u_k v_k) + \sum_{\vec{q}} u_q v_q \delta(u_k v_k^*) \right) \\ &= -\sum_{\vec{k}} (\Delta^* \delta(u_k v_k) + \Delta \delta(u_k v_k^*)) \\ &= -\sum_{\vec{k}} (\Delta \delta(u_k v_k) + \Delta \delta(u_k v_k^*)) \end{aligned}$$

On trouve alors

$$\begin{aligned} \delta(E - \mu N) &= \sum_{\vec{k}} (2(\mathcal{E}_k - \mu) (v_k \delta v_k^* + v_k^* \delta v_k) - \Delta (\delta(u_k v_k) + \delta(u_k v_k^*))) \\ &= \sum_{\vec{k}} (2(\mathcal{E}_k - \mu) (v_k \delta v_k^* + v_k^* \delta v_k) - \Delta (v_k \delta u_k + u_k \delta v_k + u_k \delta v_k^* + v_k^* \delta u_k)) \\ &= \sum_{\vec{k}} (2(\mathcal{E}_k - \mu) (v_k \delta v_k^* + v_k^* \delta v_k) \\ &\quad - \Delta \left(-v_k \frac{1}{2u_k} (v_k \delta v_k^* + v_k^* \delta v_k) + u_k \delta v_k + u_k \delta v_k^* - v_k^* \frac{1}{2u_k} (v_k \delta v_k^* + v_k^* \delta v_k) \right)) \\ &= \sum_{\vec{k}} \delta v_k^* \left(2(\mathcal{E}_k - \mu) v_k - \Delta \left(u_k - v_k \frac{1}{2u_k} v_k - v_k^* \frac{1}{2u_k} \right) \right) \\ &= + \sum_{\vec{k}} \delta v_k \left(2(\mathcal{E}_k - \mu) - \Delta \left(-v_k \frac{1}{2u_k} v_k^* + u_k - v_k^* \frac{1}{2u_k} v_k \right) \right) \end{aligned}$$

Pour minimiser cette quantité, on doit avoir

$$\begin{aligned}
0 &= 2(\mathcal{E}_k - \mu)v_k - \Delta \left(u_k - v_k \frac{1}{2u_k} v_k - v_k^* \frac{1}{2u_k} v_k \right) \\
\Leftrightarrow 2(\mathcal{E}_k - \mu)v_k &= \Delta \left(u_k - \frac{v_k}{2u_k} (v_k + v_k^*) \right) \\
&\rightarrow v_k - v_k^* = -\frac{\Delta}{2(\mathcal{E}_k - \mu)} \frac{v_k + v_k^*}{2u_k} (v_k - v_k^*) \Rightarrow v_k \in \mathbb{R} \\
\Rightarrow 2(\mathcal{E}_k - \mu)v_k u_k &= \Delta (u_k^2 - v_k^2)
\end{aligned}$$

On en déduit le système

$$\begin{cases} u_k^2 - v_k^2 = 2 \frac{\mathcal{E}_k - \mu}{\Delta} v_k u_k \\ u_k^2 + v_k^2 = 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\mathcal{E}_k - \mu}{\sqrt{(\mathcal{E}_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \right)} \\ v_k = \pm \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\mathcal{E}_k - \mu}{\sqrt{(\mathcal{E}_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \right)} \end{cases}$$

Choix des signes : on cherche un minimum de potentiel, en particulier, on veut que les états à forte énergie cinétique soient peu peuplés (ie $v_k \xrightarrow{\mathcal{E}_k \rightarrow +\infty} 0$).

On a finalement

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\mathcal{E}_k - \mu}{\sqrt{(\mathcal{E}_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \right)} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right)} \quad v_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\mathcal{E}_k - \mu}{\sqrt{(\mathcal{E}_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \right)} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right)}$$

4.3 Prédiction BCS

4.3.1 Expression du gap Delta

$$\Delta = V \sum_q u_q v_q = \frac{V}{2} \int_0^{+\infty} d\xi_k \rho(\xi_k) \sqrt{1 - \frac{\xi_k^2}{\xi_k^2 + \Delta^2}}$$

- L'intégrale ne porte en réalité pas jusqu'à l'infini : si l'électron se déplace trop rapidement, le temps d'interaction avec le réseau est trop long pour que l'interaction ait le temps d'être médiée. On peut tenir compte de ce temps en remplaçant V par $V_k = V \Theta(\xi_k - \hbar\omega_D)$, où $\omega_D \simeq 10^{13}$ Hz est la pulsation de Debye.
- Avec $\hbar\omega_D \ll E_F = \mu$, on peut remplacer dans l'intégrale $\rho(\xi_k) \simeq \rho_0$, qui correspond à la densité d'état autour du niveau de Fermi.

On a alors

$$\begin{aligned}
\Delta &= \frac{V\rho_0}{2} \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_k \sqrt{1 - \frac{\xi_k^2}{\xi_k^2 + \Delta^2}} \\
&= \frac{V\rho_0}{2} \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_k \frac{\Delta}{\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}}
\end{aligned}$$

d'où

$$\frac{1}{V\rho_0} = \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_k \frac{1}{2\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} = \arg \sinh \left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \right) \quad (1)$$

et on en déduit l'expression du gap Δ , avec un développement limité de \sinh au premier ordre en $\frac{\Delta}{\hbar\omega_D}$:

$$\Delta = 2\hbar\omega_D \exp \left(-\frac{1}{\rho_0 V} \right)$$

Remarques

1. Le résultat est non analytique en V ; il n'est donc pas accessible par la théorie des perturbations.
2. Le résultat existe pour $V > 0$ arbitrairement petit. En effet, l'équation 1 a une solution quelque soit V car

Si $\Delta \rightarrow 0$, l'intégrale $\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_k \frac{1}{2\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}}$ diverge logarithmiquement en 0. Si $\Delta \rightarrow +\infty$, l'intégrale $\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_k \frac{1}{2\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}}$ tend vers 0 de manière monotone.

Le théorème des valeurs intermédiaires assure donc l'existence d'une solution (unique).

3. Il faut noter ici l'importance de la mer de Fermi, qui permet de remplacer ρ par $\rho_0 \neq 0$. En l'absence de la mer de Fermi, on a $\rho \propto \sqrt{\xi}$ et l'intégrale $\int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_k \frac{\rho(\xi_k)}{2\sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} < \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi_k \frac{1}{2\sqrt{\xi_k}} = \sqrt{\hbar\omega_D}$. Autrement dit, si V est trop petit, il peut ne pas exister de solutions.

4.3.2 Energie de condensation

On peut estimer la différence d'énergie entre l'état normal et l'état supra.

Quel potentiel faut-il pour passer de $|0\rangle$ à $|\psi_k\rangle = \left(u_k + v_k a_{\vec{k},\uparrow}^\dagger a_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle$?

$$\begin{aligned}
 E_S &= \langle \psi_{BCS} | H_{BCS} | \psi_{BCS} \rangle \\
 &= \sum_{\vec{k}} |v_k|^2 2\xi_k - V \sum_{\vec{k}} u_k v_k \sum_{\vec{p}} u_p v_p \\
 &= \sum_{\vec{k}} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k}\right) \xi_k - \frac{\Delta^2}{V} \\
 &= \sum_{\vec{k}} \left(\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k}\right) - \frac{\Delta^2}{V}
 \end{aligned}$$

Par ailleurs, l'énergie dans l'ensemble grand canonique de l'état normal s'écrit

$$E_N = 2 \sum_{\vec{k} < k_F} \xi_k$$

La différence se met donc sous la forme

$$\begin{aligned}
E_S - E_N &= \sum_{\vec{k} < k_F} \left(-\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k} \right) + \sum_{\vec{k} > k_F} \left(\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k} \right) - \frac{\Delta^2}{V} \\
&= 2 \sum_{\vec{k} > k_F} \left(\xi_k - \frac{\xi_k^2}{E_k} \right) - \frac{\Delta^2}{V} \\
&= 2\rho_0 \int_0^{\hbar\omega_D} d\xi \left(\xi - \frac{\xi^2}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \right) - \frac{\Delta^2}{V} \\
&\quad \text{avec le changement de variable } \xi = \Delta \sinh w \\
&= 2\rho_0 \Delta \int_0^{w_D} d(\Delta \sinh w) \left(\sinh w - \frac{\sinh^2 w}{\sqrt{\sinh^2 w + 1}} \right) - \frac{\Delta^2}{V} \\
&= 2\rho_0 \Delta^2 \int_0^{w_D} dw \left(\cosh w \sinh w - \frac{\cosh w \sinh^2 w}{\cosh w} \right) - \frac{\Delta^2}{V} \\
&= 2\rho_0 \Delta^2 \int_0^{w_D} dw (\cosh w - \sinh w) \sinh w - \frac{\Delta^2}{V} \\
&= \rho_0 \Delta^2 \int_0^{w_D} dw e^{-w} (e^w - e^{-w}) - \frac{\Delta^2}{V} \\
&= \rho_0 \Delta^2 \int_0^{w_D} dw (1 - e^{-2w}) - \frac{\Delta^2}{V} \\
&= \rho_0 \Delta^2 \left(w_D + \frac{e^{-2w_D} - 1}{2w_D} \right) - \frac{\Delta^2}{V} \\
&\quad \text{or on a montré que } \Delta = 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{\rho_0 V}\right) \\
&\quad \text{et } w_D = \arg \sinh\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta}\right) \\
\Rightarrow &= \left(\frac{\Delta^2}{V} - \frac{1}{2}\rho_0 \Delta^2 \right) - \frac{\Delta^2}{V}
\end{aligned}$$

On a donc :

$$E_{\text{BCS}} - E_{\text{normal}} = -\frac{\rho_0 \Delta^2}{2}$$

On peut interpréter cette énergie de condensation à partir du champ critique, comme précédemment :

$$E_{\text{BCS}} - E_{\text{normal}} = -\frac{B_c^2}{2\mu_0} \Rightarrow B_c = \sqrt{\rho_0 \mu_0 \Delta^2}$$

5 Théorie BCS à $T \neq 0$

5.1 Les états excités

On se restreint au sous espace $\mathcal{E}_{\vec{k}} = \left\{ |0\rangle, a_{\vec{k},\uparrow}^\dagger |0\rangle, a_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger |0\rangle, a_{\vec{k},\uparrow}^\dagger a_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger |0\rangle \right\}$ et on considère la base formée des quatre vecteurs suivant

L'état fondamental $|\psi_0\rangle = \left(u_k + v_k a_{\vec{k},\uparrow}^\dagger a_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle$

On a montré précédemment que cet état, constitué de deux particules, minimise le hamiltonien BCS.

On a également montré que le potentiel nécessaire pour passer de $|0\rangle$ à $|\psi_0\rangle$ peut s'écrire **facteur 2 du potentiel** ?

$$\begin{aligned}
\delta_{\psi_k} &= |v_k|^2 2\xi_k - 2V u_k v_k \sum_{\vec{p}} u_p v_p \\
&= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right) 2\xi_k - \frac{\Delta^2}{E_k} \\
&= \xi_k - E_k
\end{aligned}$$

Les paires brisées $a_{\vec{k},\uparrow}^\dagger |0\rangle = |\vec{k}, \uparrow\rangle$ et $a_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger |0\rangle = |-\vec{k}, \downarrow\rangle$

Ces états sont bien des états propres du hamiltonien BCS. Ils ne sont constitués que d'une particule : il faut donc briser une paire pour créer cet état à partir du fondamental.

Le potentiel nécessaire pour passer de $|0\rangle$ à ces états s'écrit

$$\delta_k = \xi_k$$

La paire excitée $|\psi^*\rangle = (v_k - u_k a_{\vec{k},\uparrow}^\dagger a_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger) |0\rangle$

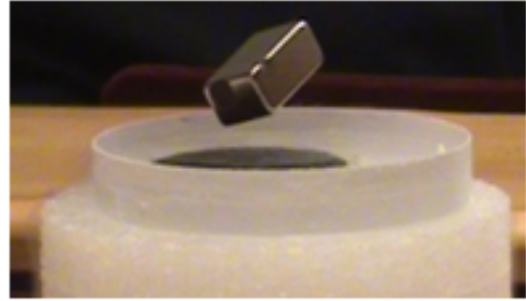
Pour compléter la base, on crée un état orthogonal aux trois précédents.

Par analogie avec δ_{ψ_k} , on peut montrer que

$$\delta_{\psi_k^*} = \xi_k + E_k$$

On voit donc apparaître la structure de niveaux suivante

- Le niveau fondamental, pris comme référence
- Deux niveaux excités dégénérés d'énergie E_k
- Un niveau excité d'énergie $2E_k$



5.2 Diagonalisation du hamiltonien BCS

On peut écrire

$$H_{BCS} = E_{BCS} + \sum_{\vec{k},\alpha} E_k \gamma_{\vec{k},\alpha}^\dagger \gamma_{\vec{k},\alpha}$$

avec

$$\gamma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger = u_k a_{\vec{k},\uparrow}^\dagger - v_k a_{-k,\downarrow}$$

$$\gamma_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger = u_k a_{-k,\downarrow}^\dagger + v_k a_{k,\uparrow}$$

Ces opérateurs sont fermioniques ie $\left\{ \gamma_{\vec{k},\alpha}^\dagger, \gamma_{\vec{k}',\beta}^\dagger \right\} = \delta_{\alpha,\beta} \delta_{\vec{k},\vec{k}'}$ et $\left\{ \gamma_{\vec{k},\alpha}^\dagger, \gamma_{\vec{k}',\beta} \right\} = 0$ et vérifient

$$\gamma_{\vec{k},\uparrow}^\dagger |\psi_0\rangle = a_{\vec{k},\uparrow}^\dagger |0\rangle$$

En d'autres termes, on décrit les excitations de l'état BCS en termes de quasi particules :

- Le niveau fondamental est doté de zéro excitations, soit $\gamma_{\vec{k},\alpha}^\dagger \gamma_{\vec{k},\alpha} = 0$ et l'énergie vaut E_{BCS} .
- Le premier niveau excité est doté d'une excitation, soit $\gamma_{\vec{k},\alpha}^\dagger \gamma_{\vec{k},\alpha} = 1$ et l'énergie vaut $E_{BCS} + E_k$.
- Le second niveau excité est doté de deux excitations, soit $\gamma_{\vec{k},\alpha}^\dagger \gamma_{\vec{k},\alpha} = 2$ et l'énergie vaut $E_{BCS} + 2E_k$.

5.3 Densité d'états

Combien d'états sont compris entre E et $E + dE$?

$$\rho(E) = \rho(\xi) \frac{d\xi}{dE}, \text{ avec}$$

$$\rho(\xi) \simeq \rho_0 \qquad E^2 = \xi^2 + \Delta^2 \Rightarrow \frac{d\xi}{dE} = \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}}$$

d'où

$$\rho(E) = \rho_0 \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}}$$

5.4 Comportement à $T \neq 0$

A température non nulle, les électrons ne forment pas nécessairement des paires. Pour déterminer l'état du système, on doit minimiser le potentiel grand canonique complet : $G = E - \mu N - TS$, avec des particules réparties dans les 4 états possibles avec une probabilité $\frac{1}{Z}$, $\frac{e^{-\beta E_k}}{Z}$, $\frac{e^{-\beta E_k}}{Z}$, $\frac{e^{-2\beta E_k}}{Z}$ respectivement, où

$$Z = 1 + 2e^{-\beta E_k} + e^{-2\beta E_k} = (1 + e^{-\beta E_k})^2$$

Expression de l'énergie

Energie cinétique

$$\begin{aligned} E_{\text{cin}} &= \sum_k \left(\frac{1}{Z_k} 2\xi_k v_k^2 + 2 \frac{e^{-\beta E_k}}{Z_k} \xi_k + \frac{e^{-2\beta E_k}}{Z_k} 2\xi_k u_k^2 \right) \\ &= \sum_k \frac{2\xi_k}{Z_k} (v_k^2 + e^{-\beta E_k} + e^{-2\beta E_k} (1 - v_k^2)) \\ &= \sum_k 2\xi_k \left(v_k^2 \frac{1 - e^{-2\beta E_k}}{(1 + e^{-\beta E_k})^2} + \frac{e^{-\beta E_k} + e^{-2\beta E_k}}{(1 + e^{-\beta E_k})^2} \right) \\ &= \sum_k 2\xi_k \left(v_k^2 \frac{(1 - e^{-\beta E_k})(1 + e^{-\beta E_k})}{(1 + e^{-\beta E_k})^2} + \frac{e^{-\beta E_k}(1 + e^{-\beta E_k})}{(1 + e^{-\beta E_k})^2} \right) \\ &= \sum_k 2\xi_k \left(v_k^2 \frac{1 - e^{-\beta E_k}}{1 + e^{-\beta E_k}} + \frac{e^{-\beta E_k}}{1 + e^{-\beta E_k}} \right) \\ &= \sum_k 2\xi_k (v_k^2 (1 - 2f(E_k)) + f(E_k)) \\ &\text{avec } f(E) = \frac{1}{1 + \exp(\beta E)} \end{aligned}$$

Energie d'interaction

Dans l'état de paire brisée, il n'y a pas d'interactions (une seule particule).

Dans l'état fondamental et l'état de paire excitée, il y

Calculs à développer.

$$E_{\text{int}} = -V \sum_{k, k'} u_k v_k (1 - 2f(E_k)) u_{k'} v_{k'} (1 - 2f(E_{k'}))$$

Entropie

Avec $S = -2k_B \sum_{\Omega} p_i \log p_i$ (facteur 2 à cause du spin), on trouve

Calculs à développer.

$$\begin{aligned}
S &= -2k_B \sum_k \frac{1}{Z_k} \left(\log \frac{1}{Z_k} + 2e^{-\beta E_k} \log \frac{e^{-\beta E_k}}{Z_k} + e^{-2\beta E_k} \log \frac{e^{-2\beta E_k}}{Z_k} \right) \\
&= -2k_B \sum_k \frac{1}{Z_k} \left(\log \frac{1}{(1 + e^{-\beta E_k})^2} + 2e^{-\beta E_k} \log \frac{e^{-\beta E_k}}{(1 + e^{-\beta E_k})^2} + e^{-2\beta E_k} \log \frac{e^{-2\beta E_k}}{(1 + e^{-\beta E_k})^2} \right) \\
&= -2k_B \sum_k (f(E_k) \log(f(E_k)) + (1 - f(E_k)) \log(1 - f(E_k)))
\end{aligned}$$

Minimisation

Astuce minimiser par rapport à $f(E_k)$

Calculs à développer.

On trouve la même expression que précédemment

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_k - \mu}{\sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \right)} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right)} \quad v_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_k - \mu}{\sqrt{(\varepsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \right)} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right)}$$

Mais avec

$$\Delta = V \sum_k^{\omega_D} u_k v_k (1 - 2f(E_k))$$

5.5 Prédiction BCS

5.5.1 Equation du Gap et température critique

On avait trouvé précédemment, pour $T = 0$, l'expression

$$\Delta(T = 0) = 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{\rho_0 V}\right)$$

On peut à présent exprimer le gap en fonction de la température :

$$\begin{aligned}
\Delta &= V \sum_k^{\omega_D} u_k v_k (1 - 2f(E_k)) \\
&= V \rho_0 \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \frac{\Delta}{2E} \tanh \frac{\beta E}{2} \\
\Rightarrow \frac{1}{V \rho_0} &= \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} \tanh \frac{\beta \sqrt{\Delta^2 + \xi^2}}{2}
\end{aligned}$$

A la température critique T_c , $\Delta = 0$ et on a alors

$$\begin{aligned}
(V \rho_0)^{-1} &= \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{1}{\xi} \tanh \frac{\beta_c \xi}{2} \\
&= \int_0^{\beta_c \omega_D / 2} \frac{dx}{x} \tanh x \\
&= \log \frac{\beta_c \omega_D}{2} \tanh \frac{\beta_c \omega_D}{2} - \int_0^{\beta_c \omega_D / 2} dx \frac{\log x}{\cosh^2 x} \\
&\simeq \log \frac{\beta_c \omega_D}{2} - \int_0^{\infty} dx \frac{\log x}{\cosh^2 x} \\
&\quad \text{car dans le régime de couplage faible } \beta_c \omega_D \gg 1 \\
\Rightarrow k_B T_c &= \hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{\rho_0 V}\right) \frac{2e^\gamma}{\pi}
\end{aligned}$$

On obtient alors un résultat fondamental, qui ne dépend pas des paramètres V et ω_D introduits de manière arbitraire :

$$\Delta_{T=0} = \frac{\pi}{e^\gamma} k_B T_c \simeq 1.76 k_B T_c$$