

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICO-QUÍMICA

SUPERCONDUTIVIDADE EM UM SEMICONDUTOR INDUZIDA POR LASER

TESE SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS

PAULO ROBERTO HAUSER

ABRIL - 1980

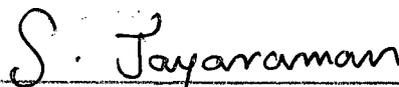
Supercondutividade em um Semicondutor Induzida por Laser

Paulo Roberto Hauser

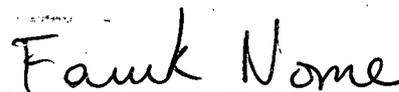
Esta tese foi julgada adequada para a obtenção do grau de

"Mestre em Ciências"

especialização Físico-Química, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação.



Prof. Subramania Jayaraman, Ph.D.
Orientador *ya te*

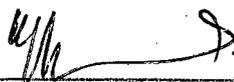


Prof. Faruk José N. Aguilera, Ph.D.
Coordenador

BANCA EXAMINADORA:



Prof. Subramania Jayaraman, Ph.D.



Prof. Vitor Hugo F. dos Santos, Ph.D.



Prof. Fernando Cabral, Ph.D.

À

MINHA FAMÍLIA

AGRADECIMENTOS

À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

AO PROFESSOR SUBRAMANIA JAYARAMAN

AO PROFESSOR VITOR HUGO FERREIRA DOS SANTOS

AO PROFESSOR FERNANDO CABRAL

AO DEPARTAMENTO DE FÍSICA

RESUMO

Nós investigamos teoricamente a supercondutividade em semicondutores tipo n com estrutura de banda indireta, como por exemplo o Ge, Si etc, induzida por laser usando um mecanismo não-fonon. Dado um semiconductor tipo n com $10^{18} \sim 10^{19}$ elétrons/cm³ na banda de condução indireta, os ftons do laser podem polarizar os elétrons da banda de valência. Os elétrons da banda de condução podem interagir com esta polarização, em um processo de segunda ordem de teoria de perturbação, resultando numa interação atrativa entre os elétrons de condução que formam pares de Cooper. Este processo origina a supercondutividade em semicondutores do tipo n. Estabelecemos uma analogia entre o mecanismo induzido elétron-quanta de polarização e o mecanismo elétron-fonon (teoria BCS) e obtivemos temperaturas críticas perto de 0°K.

ABSTRACT

We investigate theoretically superconductivity in n-type indirect band gap semiconductors such as Ge, Si etc. induced by a laser beam using a non-phonon mechanism. Given a n-type semiconductor with $10^{18} - 10^{19}$ electrons/cm³ in the indirect conduction band, photons of the laser beam can produce polarization of valence band electrons. The conduction electrons can interact with this electronic polarization in second order perturbation theory resulting in an attractive interaction between conduction electrons which consequently form Cooper pairs. This process results in superconductivity in n-type semiconductors. We have established an analogy between the induced electron-quanta of polarization mechanism and the electron-phonon (BCS Theory) mechanism, we got critical temperatures near 0°K.

S U M Á R I O

| | | |
|--------------|---|----|
| CAPÍTULO I | - INTRODUÇÃO | 1 |
| | I-1 A Supercondutividade | 1 |
| | I-2 Supercondutividade induzida por Laser .. | 3 |
| CAPÍTULO II | - MODELO DE UM SEMICONDUTOR SUPERCONDUTOR INDU- ZIDO POR LASER | 6 |
| | II-1 Formulação do Hamiltoniano do sistema . | 6 |
| | II-2 Remoção de dependência temporal | 8 |
| | II-3 Interação dos elétrons com a luz | 19 |
| CAPÍTULO III | - DIAGONALIZAÇÃO DO HAMILTONIANO E O ESPECTRO DE EXCITAÇÕES | 27 |
| | III-1 A transformação canônica de Fröhlich . | 27 |
| | III-2 Espectro de excitações | 31 |
| CAPÍTULO IV | - CÁLCULO DA TEMPERATURA CRÍTICA | 41 |
| CAPÍTULO V | - CONCLUSÕES | 47 |
| APÊNDICE A | - MUDANÇA DE REPRESENTAÇÃO POR TRANSFORMAÇÕES UNITÁRIAS | 49 |
| APÊNDICE B | - CÁLCULO DE $\gamma_p^2(p)$ | 50 |
| BIBLIOGRAFIA | | 52 |

I - INTRODUÇÃO

I-1 A SUPERCONDUTIVIDADE

O fenômeno da supercondutividade desde sua descoberta em 1911 por Kamerlingh Onnes, tem atraído muitos teóricos e experimentais pelos seus aspectos fascinantes.

Abaixo de um certo valor de temperatura crítica T_c - 1 - 10⁰K um grande número de metais e ligas metálicas sofrem uma transição para uma nova fase chamada estado supercondutor. As surpreendentes propriedades desta nova fase, como a resistência elétrica nula e diamagnetismo perfeito, tornaram-na um dos centros de interesse da Teoria de Muitos Corpos.

Bohr, Mottelson e Pines ⁽¹⁾ demonstraram que núcleos par-par exibem características da fase supercondutora. Existem evidências ⁽²⁾ que o interior de estrelas de neutrons é supercondutor. Recentemente foi descoberto ⁽³⁾ que o He³ líquido torna-se um supercondutor neutro a temperaturas abaixo de $2,7 \times 10^{-3}$ °K. Podemos notar que o fenômeno da supercondutividade não é restrito apenas aos metais e ligas metálicas.

Como aplicações do fenômeno à tecnologia podemos citar aceleradores de alta energia com imãs supercondutores, levitação magnética, sistemas de transmissão de potência etc. A descoberta de efeito Josephson ⁽⁴⁾ abriu uma nova perspectiva para aplicação das junções rápidas de Josephson na indústria de computadores. As aplicações tecnológicas exigem que o supercondutor seja mantido à temperaturas na ordem de 20 °K pois a maior temperatura crítica de supercondução observada é da ordem de 25 °K.

Bardeen, Cooper e Schreifer ⁽⁵⁾ em 1957 mostraram com a chamada Teoria de BCS que a temperatura crítica de supercondução é limitada pelo mecanismo elétron-fônon.

O mecanismo de supercondução BCS em metais é devido as interações atrativas entre os elétrons próximos a Superfície de Fermi devido a uma troca virtual de fônons. Este mecanismo dá origem a supercondutividade a temperaturas próximas ao zero absoluto. De acordo com a Teoria de BCS a temperatura crítica de supercondução é dada por:

$$T_c = 1.13 \frac{h \omega_D}{k_B} e^{-\frac{1}{N(0)g}} \quad \text{onde}$$

ω_D é a frequência de Debye

$N(0)$ é a densidade de estados na Superfície de Fermi

g é o potencial atrativo entre as partículas

k_B é a constante de Boltzmann.

Para metais normais $N(0)g \approx N(0)\gamma^2$ onde γ é a constante de acoplamento elétron-fônon, $N(0)\gamma^2$ é da ordem de 0.2 a 0.4. A temperatura de Debye é da ordem de algumas centenas de graus Kelvin. Assim a temperatura crítica T_c é uma fração muito pequena da temperatura de Debye.

Tendo em vista a limitação da temperatura crítica de supercondução a valores próximos de 20 °K, é de grande interesse a descoberta de outros mecanismos que levem a uma transição a fase supercondutora a temperaturas mais elevadas.

Com o auxílio de Lasers podemos pensar em induzir supercondutividade em semicondutores através de um mecanismo de polarização eletrônica. Investigaremos a supercondutividade induzida em um semicondutor como Ge, Si, etc., na presença de um cam-

po de Laser usando técnicas de Teoria de Muitos Corpos. Na próxima seção iremos descrever o modelo do semicondutor supercondutor.

I-2 SUPERCONDUTIVIDADE INDUZIDA POR LASER

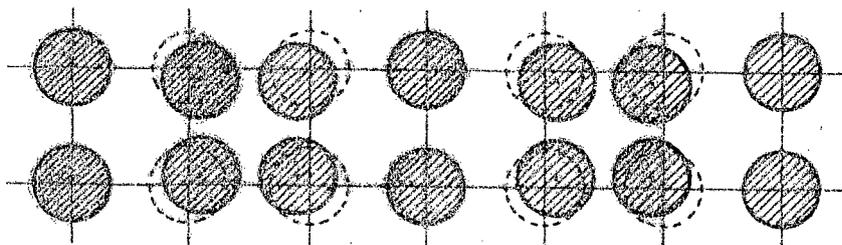


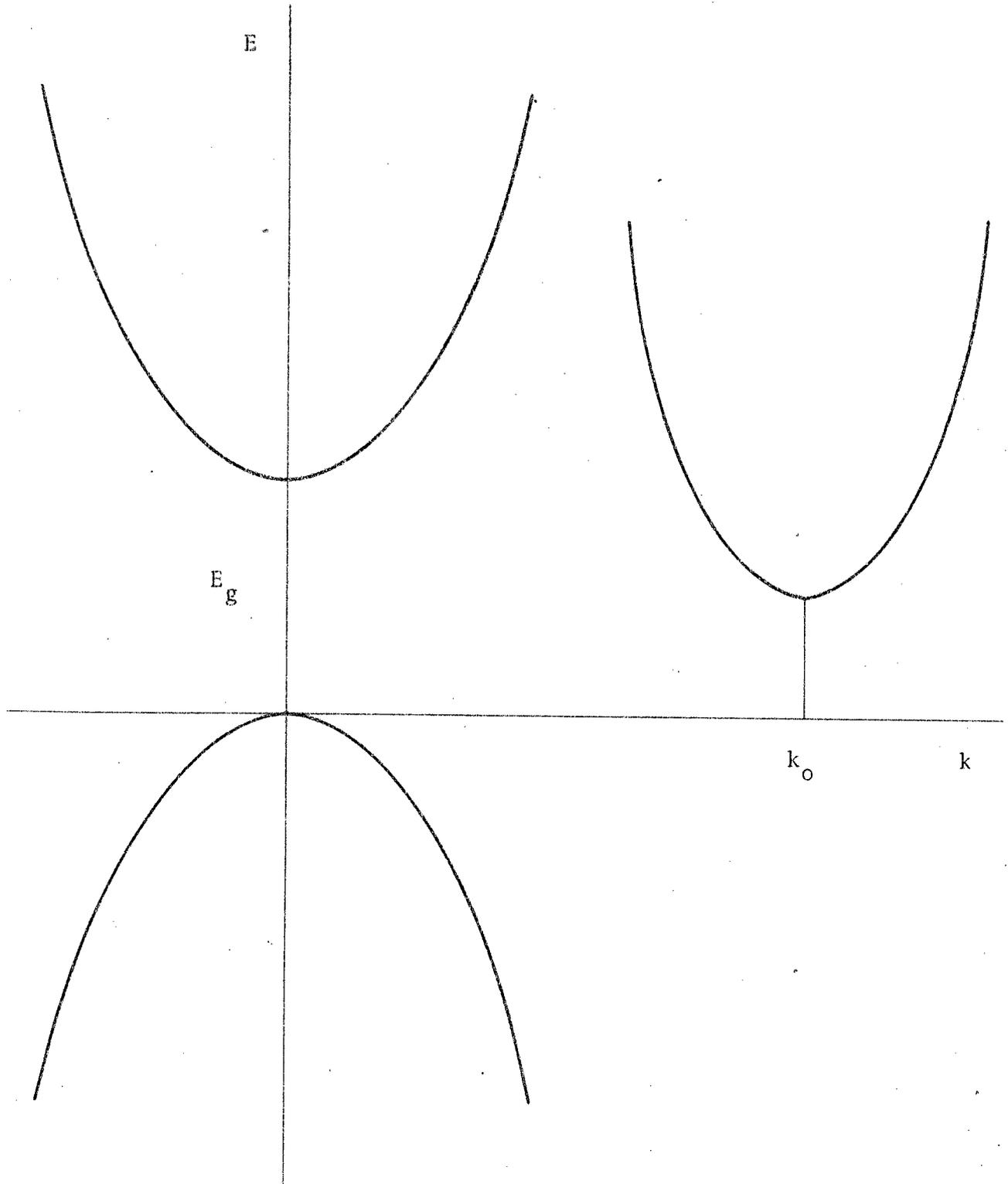
Fig. 1

No modelo BCS (veja figura 1) os elétrons interagem com a rede e a polarização resultante da rede parecia outro elétron, formando assim uma interação atrativa efetiva entre os elétrons que formam os assim chamados pares de Cooper.

Para a supercondutividade induzida por Laser consideraremos um mecanismo de polarização eletrônica:

Consideraremos um semicondutor de bandas parabólicas. O extremo da banda de Valência ocorre no centro da Zona de Brillouin ($p=0$ fig. 2). A banda de condução possui dois mínimos, mas o mínimo absoluto não coincide com o centro da Zona de Brillouin. Vários semicondutores apresentam esta estrutura de banda, por

FIGURA 2



exemplo, Ge, Si, AlSb, GaP, etc.

A banda de valência estará completa na ausência de um campo de luz.

O mínimo da banda de condução não coincidente com o centro da Zona de Brillouin contém n elétrons/cm³ introduzidos por dopagem. p simboliza o momento do elétron próximo de $p = 0$ e k simboliza o dos elétrons no mínimo absoluto de banda de condução.

Nós assumiremos que a energia do fóton do Laser é menor que o gap em $p = 0$. $E_g < h\omega$ e $E_g - h\omega \ll h\omega$. Se irradiarmos o semiconductor com um feixe de Laser as transições diretas em $p = 0$ são proibidas pela não conservação da energia. A transição indireta para o mínimo k , será considerada fortemente proibida por duas razões:

1. Porque a conservação do momento só pode ocorrer num processo de ordem mais elevada envolvendo fónons e a probabilidade de transição é muito menor.
2. Devido a dopagem da banda de condução os níveis de energia mais baixos estão preenchidos de modo que o gap efetivo é aumentado. Este fenômeno é conhecido como efeito Berstein. Isto também reduz a possibilidade de produção de portadores na banda de condução.

Como já havíamos mencionado anteriormente, esse mínimo contém elétrons por impurezas doadoras com concentrações elevadas $n \approx 10^{18} - 10^{19}$ elétrons/cm³, portanto a concentração de portadores em não-equilíbrio que pode surgir devido a absorção de luz é relativamente pequena comparada com a população em equilíbrio.

Com este modelo de semiconductor podemos estudar o mecanismo da supercondutividade induzida por Laser como segue.

A luz de alta intensidade do Laser pode aumentar a polarização dos elétrons na banda de valência e a interação Coulombiana dos elétrons do mínimo absoluto da banda de condução com esta polarização, gera uma interação atrativa efetiva entre os elétrons k e pode, portanto, formar pares de Cooper.

Será considerado apenas o mecanismo de polarização eletrônica, não se considerando a polarização da rede. Modelos similares foram estudados por V.D. Blazhin e A.S. Selivanenko ⁽⁶⁾.

Nos estudos anteriores as temperaturas críticas foram calculadas para um semicondutor ideal. Neste trabalho desenvolveremos um cálculo detalhado usando a estrutura de banda do Ge.

No Segundo Capítulo descreveremos o Hamiltoniano do semicondutor interagindo com o campo de luz na notação da Segunda Quantização. Usaremos uma transformação unitária para obter uma representação independente do tempo para o Hamiltoniano que representa o sistema. O Hamiltoniano independente do tempo será submetido as transformações de Bogolyubov ⁽⁷⁾, obteremos um Hamiltoniano cujo termo de interação representa a interação entre os elétrons k e os quanta de polarização. Esse Hamiltoniano é idêntico ao Hamiltoniano de interação elétron-fonon de Fröhlich ⁽⁸⁾.

No Terceiro Capítulo usaremos a transformação canônica proposta por Fröhlich ⁽⁹⁾ para evidenciar que ocorre em segunda ordem, um processo de interação atrativa entre os elétrons k , devido a uma troca virtual de quantas de polarização. Uma equação integral que dá a função gap será obtida no final do capítulo.

No Quarto Capítulo mostraremos os cálculos detalhados de T_c usando a estrutura de banda do Ge.

No último Capítulo, discutiremos as aproximações envolvidas no modelo e possíveis futuras investigações de supercondutividade a alta temperatura.

CAPÍTULO II

MODELO DE UM SEMICONDUTOR SUPERCONDUTOR INDUZIDO POR LASER

Neste Capítulo formularemos o Hamiltoniano de um semicondutor de banda indireta, irradiado por um laser, com as características mencionadas no capítulo anterior. Na seção II-2 usaremos uma transformação unitária para removermos a dependência temporal do Hamiltoniano. Usaremos as transformações de Bogolyubov⁽⁷⁾ na seção II-3 e obteremos um Hamiltoniano cujo termo de interação representa a interação dos elétrons k com os quanta de polarização.

II-1. Formulação do Hamiltoniano do Sistema

O Hamiltoniano do sistema na notação da Segunda Quantização pode ser escrito como segue.

$$\begin{aligned} H = & \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_p \epsilon_p (a_p^\dagger a_p + b_p^\dagger b_p) + \\ & + \sum_p \lambda(p) (a_p^\dagger a_p e^{-i\omega t} + b_p a_p e^{i\omega t}) \\ & + \sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^\dagger a_{k-q} (a_p^\dagger a_{p+q} - b_p^\dagger b_{p+q}) \quad (\text{II-1}) \text{ onde:} \end{aligned}$$

a) $\sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k$ representa a energia cinética dos elétrons k

- b) $\sum_p \epsilon_p (a_p^\dagger a_p + b_p^\dagger b_p)$ representa a energia cinética dos elétrons e buracos p
- c) $\sum_p \lambda(p) (a_p^\dagger b_p^\dagger e^{-i\omega t} + b_p a_p e^{i\omega t})$ representa a interação dos elétrons e buracos p com a luz, na aproximação dipolar semi-clássica.
- d) $\sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^\dagger a_{k-q} (a_p^\dagger a_{p+q} - b_p^\dagger b_{p+q})$ representa a interação Coulombiana entre os elétrons k e os elétrons e buracos p.

Os operadores a^\dagger , a , b^\dagger e b são operadores de Fermions que obedecem portanto as relações de anticomutação.

ϵ_p é medido a partir da metade de E_g . (Ver Fig. 2)

V_q é o potencial Coulombiano com blindagem, das interações entre os elétrons k e os elétrons e buracos p. Onde $V_q = \frac{4\pi e^2}{q^2 + q_0^2}$.

q_0^{-1} é o raio de blindagem dos elétrons livres.

x é a constante dielétrica devido a polarização da rede.

$\lambda(p) = \frac{1}{2} e A_0 v_{cp}(p)$ onde $v_{cp} = \frac{1}{m} \langle u_{cp} | \hat{p} | u_{vp} \rangle$

é o elemento de matriz da interação dos elétrons e buracos p com o campo de luz.

No Hamiltoniano nós desprezamos os processos de interação intrabanda entre os elétrons e a luz.

Este Hamiltoniano também não considera a interação Cou

lombiana entre os elétrons e buracos. O que pode ser justificado considerando-se que para $E_g > \hbar\omega$ a concentração de elétrons (buracos) p não é significativa e os elétrons k podem blindar esta interação. Sabe-se também por informações experimentais que para concentrações da ordem de $n = 10^{18}/\text{cm}^3$, que são as concentrações relevantes neste trabalho, não ocorre formação de excitons.

Na seção seguinte iremos usar uma transformação unitária em nosso Hamiltoniano para removermos a sua dependência temporal.

II-2 Remoção da dependência temporal do Hamiltoniano

O Hamiltoniano do sistema possui dependência temporal que pode ser removida por uma transformação unitária, conforme está demonstrado no apêndice A. O Hamiltoniano independente do tempo H' é dado pela expressão (II-2) abaixo.

$$H' = U^{-1} H U - i\hbar U^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U \quad (\text{II-2})$$

onde

H é o Hamiltoniano dependente do tempo da equação (II-1)

$$U^{-1} = e^{\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^\dagger a_p + b_p^\dagger b_p}$$

$$U = e^{-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^\dagger a_p + b_p^\dagger b_p}$$

Para efetuarmos esta transformação utilizaremos as pro

propriedades de anticomutação dos operadores de fermions e a expressão (II-3).

$$e^{\zeta \hat{A}} \hat{B} e^{-\zeta \hat{A}} = \hat{B} + \zeta [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\zeta^2}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \\ + \frac{\zeta^3}{3!} [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (\text{II-3})$$

onde \hat{A} e \hat{B} são operadores e ζ é um parâmetro.

Consideremos o termo $-ih U^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U$ de (II-2)

$$-ih U^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U = -ih \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] \times$$

$$\times \frac{\partial}{\partial t} \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right]$$

$$-ih U^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U = -\frac{h\omega}{2} \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] \left(\sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right) \times$$

$$\times \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right]$$

Comparando com II-3 teremos $\zeta = \frac{i\omega t}{2}$

$$\hat{A} = \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \quad \text{e} \quad \hat{B} = \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \quad \text{como}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad \text{bem como os demais comutadores.}$$

$$\text{Temos então } -i\hbar U^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U = -\frac{\hbar\omega}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p$$

Consideremos agora a aplicação dos operadores U e U^{-1} em H . Dividiremos a operação em quatro etapas.

$$1) U^{-1} \left(\sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k \right) U = \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] \left(\sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k \right) \times \\ \times \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p a_p^+ + b_p b_p^+ \right]$$

$$\text{comparando com (II-3) temos } \zeta = \frac{i\omega t}{2}$$

$$\hat{A} = \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \quad \text{e} \quad \hat{B} = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \left[\sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p, \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k \right]$$

$$\left[\sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p, \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k \right] = \left[\sum_p a_p^+ a_p, \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k \right] + \\ + \left[\sum_p b_p^+ b_p, \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k \right]$$

$$\text{como } \left[\sum_p a_p^+ a_p, \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k \right] = 0 \quad \text{e}$$

$$\left[\sum_p b_p^+ b_p, \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k \right] = 0$$

$$\text{então } [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad \text{e} \quad U^{-1} \left(\sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k \right) U = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k$$

$$\begin{aligned}
2) \quad U^{-1} (\sum_p \epsilon_p (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p)) U &= \\
&= \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (\sum_p \epsilon_p (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p)) \times \\
&\times \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right]
\end{aligned}$$

Comparando com II-3 teremos $\zeta = \frac{i\omega t}{2}$

$$\hat{A} = \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \quad \text{e} \quad \hat{B} = \sum_p \epsilon_p (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p, \sum_p \epsilon_p (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p)]$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad \text{e}$$

$$U^{-1} (\sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p) U = \sum_p \epsilon_p (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p)$$

$$3) \quad U^{-1} (\sum_p \lambda(p) (a_p^+ b_p^+ e^{-i\omega t} + b_p a_p e^{i\omega t})) U$$

Consideremos a primeira parcela de soma.

$$U^{-1} (\sum_p \lambda(p) a_p^+ b_p^+ e^{-i\omega t}) U$$

$$U^{-1} (\sum_p \lambda(p) a_p^+ b_p^+ e^{-i\omega t}) U =$$

$$= \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (\sum_p \lambda(p) a_p^+ b_p^+ e^{-i\omega t}) \times$$

$$x \text{ Exp } \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right]$$

$$U^{-1} \left(\sum_p \lambda(p) a_p^+ b_p^+ + e^{-i\omega t} \right) U =$$

$$= \sum_p \lambda(p) e^{-i\omega t} \left(\text{Exp } \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (a_p^+ b_p^+) \right) x$$

$$x \text{ Exp } \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right]$$

$$\text{vamos comparar Exp } \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (a_p^+ b_p^+) x$$

$$x \text{ Exp } \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] \text{ com II-3 e}$$

$$\text{teremos } \zeta = \frac{i\omega t}{2} \quad \hat{A} = \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \quad e$$

$$\hat{B} = a_p^+ b_p^+$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \left[\sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p, a_p^+ b_p^+ \right]$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \left[\sum_p a_p^+ a_p, a_p^+ b_p^+ \right] + \left[\sum_p b_p^+ b_p, a_p^+ b_p^+ \right]$$

$$\left[\sum_p a_p^+ a_p, a_p^+ b_p^+ \right] = a_p^+ b_p^+$$

$$\left[\sum_p b_p^+ b_p, a_p^+ b_p^+ \right] = a_p^+ b_p^+ \quad \text{então}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 2 a_p^+ b_p^+$$

Pode-se também mostrar que $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 4 a_p^+ b_p^+$ e

$[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] = 8 a_p^+ b_p^+$ e assim por diante.

Podemos então escrever

$$\begin{aligned} & \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (a_p^+ b_p^+) \quad \times \\ & \times \text{Exp} \left[- \frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] = a_p^+ b_p^+ + \left(\frac{i\omega t}{2} \right)^2 a_p^+ b_p^+ + \\ & + \left(\frac{i\omega t}{2} \right)^2 \frac{4 a_p^+ b_p^+}{2!} + \left(\frac{i\omega t}{2} \right)^3 \frac{8 a_p^+ b_p^+}{3!} + \dots \quad \text{ou} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (a_p^+ b_p^+) \quad \times \\ & \times \text{Exp} \left[- \frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] = a_p^+ b_p^+ \left(1 + \frac{i\omega t}{2} + \frac{(i\omega t)^2}{2!} + \right. \\ & \left. + \frac{(i\omega t)^3}{3!} + \dots \right) \end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned} & \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (a_p^+ b_p^+) \quad \times \\ & \times \text{Exp} \left[- \frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] = a_p^+ b_p^+ e^{i\omega t} \end{aligned}$$

A parcela $U^{-1} \left(\sum_p \lambda(p) a_p^+ b_p^+ e^{-i\omega t} \right) U$ pode ser escrita como:

$$U^{-1} \left(\sum_p \lambda(p) a_p^+ b_p^+ e^{-i\omega t} \right) U = \sum_p \lambda(p) a_p^+ b_p^+$$

Consideremos agora a segunda parcela

$$U^{-1} \left(\sum_p \lambda(p) b_p a_p e^{i\omega t} \right) U$$

$$U^{-1} \left(\sum_p \lambda(p) b_p a_p e^{i\omega t} \right) U =$$

$$= \sum_p \lambda(p) e^{i\omega t} \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (b_p a_p) \times$$

$$\times \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right]$$

$$\text{Comparando } \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (b_p a_p) \times$$

$$\times \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] \text{ com II-3 tere-$$

$$\text{mos } \zeta = \frac{i\omega t}{2} \quad \hat{A} = \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \quad e \quad \hat{B} = b_p a_p$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \left[\sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p, b_p a_p \right]$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \left[\sum_p a_p^+ a_p, b_p a_p \right] + \left[\sum_p b_p^+ b_p, b_p a_p \right] \quad \text{onde}$$

$$[\sum_p a_p^+ a_p, b_p a_p] = -b_p a_p \quad \text{e} \quad [\sum_p b_p^+ b_p, b_p a_p] = -b_p a_p$$

$$\text{ent\~{a}o} \quad [\hat{A}, \hat{B}] = -2 b_p a_p \quad \text{bem como} \quad [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = -4 b_p a_p$$

$$\text{e} \quad [\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] = -8 b_p a_p$$

Podemos ent\~{a}o escrever

$$\begin{aligned} \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (b_p a_p) \quad \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] &= \\ &= b_p a_p - \left(\frac{i\omega t}{2}\right) (-2 b_p a_p) + \left(\frac{i\omega t}{2}\right)^2 \frac{(-4 b_p a_p)}{2!} + \\ &+ \left(\frac{i\omega t}{2}\right)^3 \frac{(-8 b_p a_p)}{3!} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{ou} \quad \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (b_p a_p) \quad \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] &= \\ &= b_p a_p e^{-i\omega t} \end{aligned}$$

$$\text{e} \quad U^{-1} \left(\sum_p \lambda(p) b_p a_p e^{i\omega t} \right) U = \sum_p \lambda(p) b_p a_p$$

Podemos agora escrever a express\~{a}o completa

$$\begin{aligned} U^{-1} \left(\sum_p \lambda(p) (a_p^+ b_p^+ e^{-i\omega t} + b_p a_p e^{i\omega t}) \right) U &= \\ &= \sum_p \lambda(p) (a_p^+ b_p^+ + b_p a_p) \end{aligned}$$

$$4) U^{-1} \left[\sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} (a_p^+ a_{p+q} - b_p^+ b_{p+q}) \right] U$$

Desmembraremos a transformação em duas

$$a) U^{-1} \left(\sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} a_p^+ a_{p+q} \right) U$$

$$\text{ou } \sum_{kpq \neq 0} V_q \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (a_k^+ a_{k-q} a_p^+ a_{p+q}) \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right]$$

Comparemos

$$\text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (a_k^+ a_{k-q} a_p^+ a_{p+q}) \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p - b_p^+ b_p \right] \quad \text{com II-3}$$

$$\zeta = \frac{i\omega t}{2} \quad \hat{A} = \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \quad \hat{B} = a_k^+ a_{k-q} a_p^+ a_{p+q}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \left[\sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p, a_k^+ a_{k-q} a_p^+ a_{p+q} \right]$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad e$$

$$\text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (a_k^+ a_{k-q} a_p^+ a_{p+q}) \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] = a_k^+ a_{k-q} a_p^+ a_{p+q}$$

$$\text{então } U^{-1} \left[\sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} a_p^+ a_{p+q} \right] U = \sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} a_p^+ a_{p+q}$$

$$b) U^{-1} \left(\sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} b_p^+ b_{p+q} \right) U$$

$$\text{ou } \sum_{kpq \neq 0} V_q \text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] (a_k^+ a_{k-q} b_p^+ b_{p+q}) \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right]$$

Comparemos $\text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] a_k^+ a_{k-q} b_p^+ b_{p+q} \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right]$

$$\zeta = \frac{i\omega t}{2} \quad \hat{A} = \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \quad e \quad \hat{B} = a_k^+ a_{k-q} b_p^+ b_{p+q}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \left[\sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p, a_k^+ a_{k-q} b_p^+ b_{p+q} \right]$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad e$$

$$\text{Exp} \left[\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] a_k^+ a_{k-q} b_p^+ b_{p+q} \text{Exp} \left[-\frac{i\omega t}{2} \sum_p a_p^+ a_p + b_p^+ b_p \right] = a_k^+ a_{k-q} b_p^+ b_{p+q}$$

$$\text{então } U^{-1} \left[\sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} b_p^+ b_{p+q} \right] U =$$

$$= \sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} b_p^+ b_{p+q}$$

A transformação completa é dado por

$$U^{-1} \left[\sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} (a_p^+ a_{p+q} - b_p^+ b_{p+q}) \right] U =$$

$$= \sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} (a_p^+ a_{p+q} - b_p^+ b_{p+q})$$

Vamos agora escrever o Hamiltoniano independente do tempo de acordo com a expressão II-2.

$$H' = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k + \sum_p \epsilon_p (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p) +$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_p \varepsilon(p) (a_p^+ b_p^+ + b_p a_p) \\
& + \sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} (a_p^+ a_{p+q} - b_p^+ b_{p+q}) + \\
& - \sum_p \frac{\hbar\omega}{2} (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p)
\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
H' = & \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k + \sum_p (\varepsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2}) (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p) + \\
& + \sum_p \lambda(p) (a_p^+ b_p^+ + b_p a_p) + \\
& + \sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} (a_p^+ a_{p+q} - b_p^+ b_{p+q})
\end{aligned} \tag{II-4}$$

O Hamiltoniano obtido tornou-se independente do tempo. Na seção seguinte aplicaremos as transformações de Bogolyubov no Hamiltoniano da equação II-4 e obteremos um Hamiltoniano cujo termo de interação representa a interação entre os elétrons k e os quanta de polarização.

II-3 Interação dos elétrons com a luz

O campo de luz do Laser interage com os elétrons e buracos p . Aplicaremos as transformações de Bogolyubov no Hamiltoniano independente do tempo (II-4) e obteremos um Hamiltoniano que representa a interação dos elétrons k com os quanta de polarização.

Consideremos o Hamiltoniano da equação II-4

$$\begin{aligned}
 H' = & \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k + \sum_p \left(\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2} \right) (a_p^\dagger a_p + b_p^\dagger b_p) + \\
 & + \sum_p \lambda(p) (a_p^\dagger b_p^\dagger + b_p a_p) + \\
 & + \sum_{kqp \neq 0} V_q a_k^\dagger a_{k-q} (a_p^\dagger a_{p+q} - b_p^\dagger b_{p+q})
 \end{aligned}$$

e as transformações de Bogolyubov⁽⁷⁾

$$\begin{aligned}
 a_p &= u_p \alpha_p + v_p \beta_p^\dagger & a_p^\dagger &= u_p \alpha_p^\dagger + v_p \beta_p \\
 b_p &= u_p \beta_p - v_p \alpha_p^\dagger & b_p^\dagger &= u_p \beta_p^\dagger - v_p \alpha_p \\
 \alpha_p &= u_p a_p - v_p b_p^\dagger & \alpha_p^\dagger &= u_p a_p^\dagger - v_p b_p \\
 \beta_p &= v_p a_p^\dagger + u_p b_p & \beta_p^\dagger &= v_p a_p - u_p b_p^\dagger
 \end{aligned}$$

com as propriedades $\{\alpha_p, \alpha_p^\dagger\} = \{\beta_p, \beta_p^\dagger\} = 1$ e todos outros anticomutadores nulos. Onde u_p e v_p são parâmetros a determinar.

$$\{a_p, a_p^+\} = 1 \quad e \quad u_p^2 + v_p^2 = 1.$$

Aplicamos a transformação nos termos interagentes com a luz:

$$\begin{aligned}
 1) \quad & \sum_p \left(\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2} \right) (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p) = \\
 & = \sum_p \left(\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2} \right) [(u_p \alpha_p^+ + v_p \beta_p)(u_p \alpha_p + v_p \beta_p^+) + \\
 & + (u_p \beta_p^+ - v_p \alpha_p)(u_p \beta_p - v_p \alpha_p^+)] \\
 & \sum_p \left(\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2} \right) [a_p^+ a_p + b_p^+ b_p] = \sum_p \left(\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2} \right) [(u_p^2 - v_p^2)(\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) + \\
 & + 2 u_p v_p (\beta_p \alpha_p + \alpha_p^+ \beta_p^+) + 2 v_p^2] \\
 2) \quad & \sum_p \lambda(p) (a_p^+ b_p^+ + b_p a_p) = \\
 & = \sum_p \lambda(p) [(u_p \alpha_p^+ + v_p \beta_p)(u_p \beta_p^+ - v_p \alpha_p) + \\
 & + (u_p \beta_p - v_p \alpha_p^+)(u_p \alpha_p + v_p \beta_p^+)] \\
 & \sum_p \lambda(p) (a_p^+ b_p^+ + b_p a_p) = \\
 & \sum_p \lambda(p) [(u_p^2 - v_p^2)(\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p) +
 \end{aligned}$$

$$- 2u_p v_p (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) + 2 u_p v_p]$$

$$3) \sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} (a_p^+ a_{p+q} - b_p^+ b_{p+q})$$

$$a_p^+ a_{p+q} = (u_p \alpha_p^+ + v_p \beta_p^+) (u_{p+q} \alpha_{p+q} + v_{p+q} \beta_{p+q}^+)$$

$$a_p^+ a_{p+q} = u_p u_{p+q} \alpha_p^+ \alpha_{p+q} + u_p v_{p+q} \alpha_p^+ \beta_{p+q}^+ + u_{p+q} v_p \beta_p \alpha_{p+q} + \\ + v_p v_{p+q} \beta_p \beta_{p+q}^+$$

$$b_p^+ b_{p+q} = (u_p \beta_p^+ - v_p \alpha_p) (u_{p+q} \beta_{p+q} - v_{p+q} \alpha_{p+q}^+)$$

$$b_p^+ b_{p+q} = u_p u_{p+q} \beta_p^+ \beta_{p+q} - u_p v_{p+q} \beta_p^+ \alpha_{p+q}^+ +$$

$$- u_{p+q} v_p \alpha_p \beta_{p+q} + v_p v_{p+q} \alpha_p \alpha_{p+q}^+$$

$$a_p^+ a_{p+q} - b_p^+ b_{p+q} = u_p u_{p+q} \alpha_p^+ \alpha_{p+q} + u_p v_{p+q} \alpha_p^+ \beta_{p+q}^+ +$$

$$+ u_{p+q} v_p \beta_p \alpha_{p+q} + v_p v_{p+q} \beta_p \beta_{p+q}^+ - u_p u_{p+q} \beta_p^+ \beta_{p+q} +$$

$$+ u_p v_{p+q} \beta_p^+ \alpha_{p+q}^+ + u_{p+q} v_p \alpha_p \beta_{p+q} + v_{p+q} v_p \alpha_{p+q}^+ \alpha_p$$

Desprezando os termos referentes a número de quasi-partículas e por considerações de simetria⁽¹⁰⁾ obteremos:

$$a_p^+ a_{p+q} - b_p^+ b_{p+q} = (u_{p+q} v_p - u_p v_{p+q}) (\alpha_{p+q}^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_{p+q}^+) e$$

$$\sum_{kpq \neq 0} V_q a_k^+ a_{k-q} [(u_{p+q} v_p - u_p v_{p+q}) (\alpha_{p+q}^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_{p+q})]$$

Podemos reescrever o Hamiltoniano da equação II-4 como segue

$$H' = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k + \sum_p [(\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2})(u_p^2 - v_p^2) - 2u_p v_p \lambda(p)] (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p)$$

$$+ \sum_p [\lambda(p)(u_p^2 - v_p^2)^2 + 2u_p v_p (\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2})] (\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p)$$

$$+ \sum_p (\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2}) 2v_p^2 + 2\lambda(p) v_p u_p$$

$$+ \sum_{kpq \neq 0} \gamma V_q a_k^+ a_{k-q} (\alpha_{p+q}^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_{p+q}) \quad \text{onde}$$

$$\gamma = (u_{p+q} v_p - u_p v_{p+q})$$

Considerando que:

$$1) \text{ O termo } \sum_p [(\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2})(u_p^2 - v_p^2) +$$

$$- 2u_p v_p \lambda(p)] (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) \text{ pode ser des-}$$

prezado, pois pela não conservação da energia não há formação de quasi partículas.

$$2) \text{ O termo } \sum_p (\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2}) 2v_p^2 + 2u_p v_p \lambda(p) \text{ é constante}$$

3) O termo $\sum_p [\lambda(p)(u_p^2 - v_p^2) + 2 u_p v_p (\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2})] (\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p)$ deverá ser

anulado para diagonalizar o Hamiltoniano.

$$\lambda(p)(u_p^2 - v_p^2) + 2 u_p v_p (\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2}) = 0$$

$$\text{Fazendo } \zeta_p = (\epsilon_p - \frac{\hbar\omega}{2}) \quad u_p = \cos\theta_p \quad v_p = \text{sen}\theta_p$$

e substituindo vem

$$2 \cos\theta_p \text{sen}\theta_p \zeta_p + (\cos^2\theta_p - \text{sen}^2\theta_p) \lambda(p) = 0 \quad \text{ou}$$

$$\text{tg } 2\theta_p = - \frac{\lambda(p)}{\zeta_p}$$

$$\text{Fazendo } E_p = \sqrt{\lambda^2(p) + \zeta_p^2} \quad \text{e lembrando que}$$

$$\text{sen}^2 2\theta_p + \cos^2 2\theta_p = 1 \quad \text{obteremos } \text{sen } 2\theta_p = \pm \frac{\lambda(p)}{E_p}$$

$$\cos 2\theta_p = \pm \frac{\zeta_p}{E_p} \quad \text{e}$$

$$u_p v_p = \frac{\lambda(p)}{2 E_p} \quad u_p^2 - v_p^2 = - \frac{\lambda(p)}{E_p}$$

$$\text{onde } u_p^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\zeta_p}{E_p}\right) \quad \text{e } v_p^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\zeta_p}{E_p}\right) \quad \text{estas rela}$$

ções serão úteis quando determinarmos o espectro de excitações.

4) O termo $\sum_{kpq \neq 0} \gamma V_q a_k a_{k-q} (\alpha_{p+q}^+ \beta_p + \beta_p \alpha_{p+q})$ pode ser

reescrito definindo-se os operadores $d_q^+ = \alpha_{p+q}^+ \beta_p$ e

$d_q = \beta_p \alpha_{p+q}$. Podemos mostrar considerando que não há

formação de quasi-partículas que d_q^+ e d_q obedecem a relação de comutação $[d_q, d_q^+] = 1$

$$[d_q, d_q^+] = d_q d_q^+ - d_q^+ d_q$$

$$[d_q, d_q^+] = \beta_p \alpha_{p+q} \alpha_{p+q}^+ \beta_p^+ - \alpha_{p+q}^+ \beta_p^+ \beta_p \alpha_p$$

$$[d_q, d_q^+] = \alpha_{p+q} \alpha_{p+q}^+ \beta_p \beta_p^+ - \alpha_{p+q}^+ \alpha_{p+q} \beta_p^+ \beta_p$$

As quasi-partículas obedecem as relações de anti-comutação e $\alpha_{p+q}^+ \alpha_{p+q} = n_\alpha$ $\beta_p^+ \beta_p = n_\beta$ onde n_α é o número de quasi-partículas α e n_β é o número de quasi-partículas β .

$$\text{Então } [d_q, d_q^+] = (1 - n_\alpha)(1 - n_\beta) - n_\alpha n_\beta \quad \text{ou}$$

$[d_q, d_q^+] = 1 - n_\alpha - n_\beta$ como $n_\alpha \approx n_\beta \approx 0$ porque estamos supondo que não há formação de quasi partículas

$$[d_q, d_q^+] = 1$$

Os operadores d_q e d_q^+ obedecem a relação da comutação representando bosons que são os quanta de polarização devidos a interação da luz com os elétrons e buracos p . Obteremos então:

$$\sum_{kpq \neq 0} \gamma V_q a_k^+ a_{k-q} (d_q^+ + d_q) \text{ que representa a interação}$$

entre os elétrons k e os quanta de polarização. Um elétron k' pode ser espalhado para um estado k pela absorção (Figura 3a) ou emissão (Figura 3b) de um quanta de polarização.

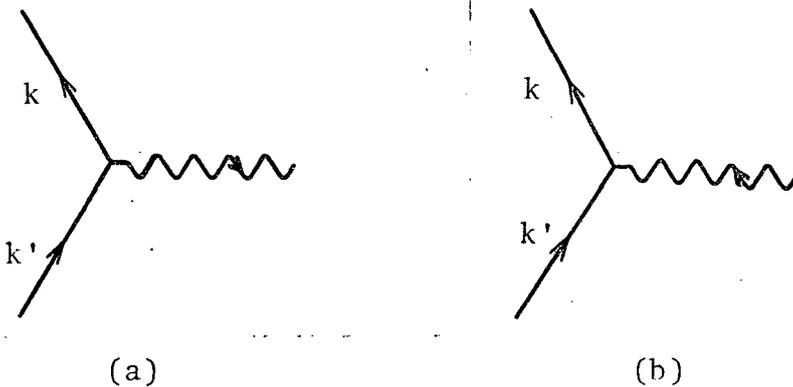


Fig. 3

Podemos agora escrever o Hamiltoniano do sistema como segue:

$$H = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k + \sum_p \epsilon_q d_q^+ d_q + \sum_{kpq \neq 0} \gamma V_q a_k^+ a_{k-q} (d_p^+ + d_q) \quad (\text{II-5})$$

onde $\sum_q \epsilon_q d_q^+ d_q$ é a energia cinética dos quanta de polarização.

O Hamiltoniano II-5 é idêntico ao Hamiltoniano elétron-fonon de Fröhlich. No Capítulo seguinte usaremos a transformação

canônica de Fröhlich, para evidenciar que ocorre uma interação atrativa efetiva entre os elétrons k , pela troca virtual de quantas de polarização, em um processo de segunda ordem.

CAPÍTULO III

DIAGONALIZAÇÃO DO HAMILTONIANO E O ESPECTRO DE EXCITAÇÕES

Na secção III-1 o Hamiltoniano II-5 será submetido a transformação canônica proposta por Fröhlich⁽⁹⁾. Esta transformação mostra que, em um processo de segunda ordem de Teoria de Perturbação ocorre uma interação atrativa, efetiva entre os elétrons k , devido a uma troca virtual de quantas de polarização.

Na secção III-2 discutiremos a formação dos pares de Cooper e sua descrição através de um Hamiltoniano consistente com a Teoria de Muitos Corpos. Aplicaremos as transformações de Bogolyubov para diagonalizar o Hamiltoniano proposto e obteremos ao final uma equação integral que dá a função gap.

III-1 Transformação canônica de Fröhlich

O Hamiltoniano II-5 pode ser escrito como

$$H = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k + \sum_q \epsilon_q d_q^+ d_q + \sum_{kk'} \gamma' V_q a_k^+ a_{k'} (d_q^+ + d_q) \quad (\text{III-1})$$

$$\text{onde } \gamma' = \sum_q \gamma \quad \text{e} \quad V_q = V(k - k')$$

Podemos dividir H em duas partes

$$1) H_0 = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k + \sum_q \epsilon_q d_q^+ d_q \quad (\text{termo não perturbado})$$

$$2) H_p = \sum_{kk'} \gamma' V_q a_k^+ a_{k'} (d_q^+ + d_q) \quad (\text{termo de interação})$$

Consideremos a transformação proposta por Frohlich

$$H' = e^{-S} H e^S \quad (\text{III-2})$$

onde S é um operador a ser determinado de forma a eliminar em primeira ordem H_p .

$$H' = (1 - \frac{1}{2} SHS^2 + \dots) H (1 + S + \frac{1}{2} S^2 + \dots) \quad \text{ou}$$

$$H' = H_0 + H_p + [H_0, S] + [H_p, S] + \frac{1}{2} [[H_0, S], S] + \dots \quad (\text{III-3})$$

Escolheremos um S tal que satisfaz a condição

$$[H_0, S] + H_p = 0 \quad \text{III-4} \quad \text{onde}$$

$$S = \sum_{kk'} M_{kk'} (Ad_q^+ + Bd_q) a_k^+ a_k, \quad \text{sendo } M_{kk'} = \gamma' V_q$$

A e B são constantes a determinar.

Determinemos S com o auxílio da condição III-4

$$[H_0, S] = \left[\sum_{kk'} \left\{ \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k + \sum_q \epsilon_q d_q^+ d_q \right\}, \sum_{k'k''} M_{k'k''} (Ad_q^+ + Bd_q) a_{k'}^+ a_{k''} \right]$$

$$[H_0, S] = \sum_{k'k''} M_{k'k''} (Ad_q^+ + Bd_q) (\epsilon_{k'} - \epsilon_{k''}) a_{k'}^+ a_{k''} +$$

$$+ \sum_{k'k''} M_{k'k''} (Ad_q^+ - Bd_q) \epsilon_q a_{k'}^+ a_{k''}$$

$$\text{como } [H_0, S] + H_p = 0 \quad \text{vem}$$

$$\sum_{k', k''} M_{k', k''} (\text{Ad}_q^+ + B d_q) (\epsilon_{k'} - \epsilon_{k''}) a_{k', a_{k''}}^+ +$$

$$\sum_{k', k''} M_{k', k''} (\text{Ad}_q^+ + B d_q) \epsilon_q a_{k', a_{k''}}^+ +$$

$$\sum_{k', k''} M_{k', k''} (d_q^+ + d_q) a_{k', a_{k''}}^+ \quad \text{ou}$$

$$\sum_{k', k''} M_{k', k''} [A(\epsilon_{k'} - \epsilon_{k''}) d_q^+ + d_q B(\epsilon_{k'} - \epsilon_{k''})] a_{k', a_{k''}}^+ +$$

$$\sum_{k', k''} M_{k', k''} [(A \epsilon_q - 1) d_q^+ + (1 - B \epsilon_q) d_q] a_{k', a_{k''}}^+ = 0$$

o que implica em

$$A(\epsilon_{k'} - \epsilon_{k''}) + A \epsilon_q + 1 = 0 \quad e$$

$$B(\epsilon_{k'} - \epsilon_{k''}) + 1 - B \epsilon_q = 0$$

donde

$$A = - \frac{1}{(\epsilon_{k'} - \epsilon_{k''} + \epsilon_q)} \quad B = - \frac{1}{(\epsilon_{k'} - \epsilon_{k''} - \epsilon_q)}$$

$$e \quad S = - \sum_{kk'} \left\{ \frac{d_q^+}{(\epsilon_k - \epsilon_{k'} + \epsilon_q)} + \frac{d_q}{(\epsilon_k - \epsilon_{k'} - \epsilon_q)} \right\} M_{kk'} a_k^+ a_{k'}$$

Considerando-se propriedades de comutação e anti-comutação e desprezando-se os termos superiores a S^2 , pois estes contêm correlações entre mais de dois elétrons, III-3 fica.

$$H' = H_0 + \frac{1}{2} [H_p, S] \quad \text{ou} \quad H' = H_0 - \frac{1}{2} [H_p, S'] \quad \text{onde} \quad S' = -S$$

Determinemos $[H_p, S']$

$$\begin{aligned}
 [H_p, S'] = & \sum_{kk'} \sum_{k_1 k_2} M_{kk'} M_{k_1 k_2} (d_q^+ + d_q) \left\{ \frac{d_q^+}{(\epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2} + \epsilon_q)} + \right. \\
 & \left. + \frac{d_q}{(\epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2} - \epsilon_q)} \right\} a_k^+ a_{k'} a_{k_1}^+ a_{k_2} \\
 & + \sum_{kk'} \sum_{k_1 k_2} M_{kk'} M_{k_1 k_2} \left\{ \frac{d_q^+}{(\epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2} + \epsilon_q)} + \frac{d_q}{(\epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2} - \epsilon_q)} \right\} a_{k_1}^+ a_{k_2} a_k^+ a_{k'}
 \end{aligned}$$

Usando propriedades de comutação e anti-comutação pode-se facilmente mostrar que

$$[H_p, S'] = - \sum_{kk'} \sum_{k_1 k_2} M_{kk'} M_{k_1 k_2} \left\{ \frac{2\epsilon_q}{(\epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2})^2 + (\epsilon_q)^2} \right\} a_{k_1}^+ a_k^+ a_{k_2} a_{k'}$$

$$e \quad H' = H_0 + \sum_{kk'} \sum_{k_1 k_2} M_{kk'} M_{k_1 k_2} \left\{ \frac{\epsilon_q}{(\epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2})^2 - (\epsilon_q)^2} \right\} a_{k_1}^+ a_k^+ a_{k_2} a_{k'} \quad (\text{III-5})$$

O Hamiltoniano III-5 pode ser reescrito como

$$H' = H_0 + \sum_{kk'} \sum_q (\gamma' V_q)^2 \left(\frac{\epsilon_q^2}{(\epsilon_k - \epsilon_{k-q})^2 - (\epsilon_q)^2} \right) a_{k'+q}^+ a_{k-q}^+ a_k a_{k'} \quad (\text{III-6})$$

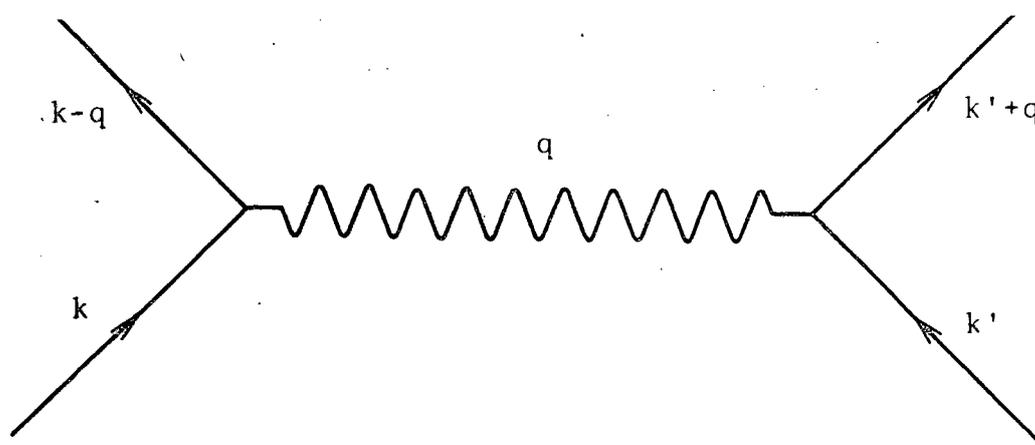


Fig. 4

Sobre o Hamiltoniano III-6 podemos fazer as seguintes considerações:

- 1) H_0 é o termo não perturbado representando as energias cinéticas dos elétrons k e dos quanta de polarização.
- 2) O termo de interação representa a interação entre os elétrons k e k' através do potencial $\gamma' V_q$. (Ver Fig.4).

Considerando que os elétrons k e k' , que contribuem para o processo, estão próximos a superfície de Fermi e $(\epsilon_k - \epsilon_{k-q})^2 - \epsilon_q^2 < 0$, portanto o termo de interação é atrativo e podemos esperar a formação de pares de Cooper. A interação atrativa entre os elétrons k é devida a uma troca virtual de quantas de polarização.

Na seção seguinte discutiremos a formação dos pares de Cooper e a formulação do Hamiltoniano.

III-2 Espectro de excitações

Cooper mostrou que em um modelo cujo Hamiltoniano é descrito por pares de elétrons de momentuns e spins opostos ($k\uparrow$) e ($-k\downarrow$), com uma interação atrativa, podem surgir estados ligados. Nesta seção mostraremos que os pares de Cooper podem tornar instável o mar de Fermi dando origem ao surgimento de um gap no espectro de energias.

O Hamiltoniano III-6 é idêntico ao Hamiltoniano de BCS exceto o potencial de interação entre as partículas.

Considerando nosso sistema como um gás de Fermi (elétrons K) interagindo com um gás de Bosons (quanta de polarização) podemos escrever o Hamiltoniano como segue ⁽¹⁰⁾.

$$H = \sum_k (\epsilon_k - \mu) (a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} + a_{-k\downarrow}^+ a_{-k\downarrow}) + \sum_{kk'q} M_{kk'q} a_{k\uparrow}^+ a_{-k'\downarrow}^+ a_{-k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow} \quad (\text{III-7})$$

onde $M_{kk'q}$ é o elemento de matriz da interação, μ é o potencial químico, e $\xi_k = \epsilon_k - \mu$.

Usaremos as transformações de Bogolyubov

$$\begin{aligned} a_{k\uparrow}^+ &= u_k \alpha_k^+ + v_k \beta_{-k}^+ & \alpha_k^+ &= u_k a_{k\uparrow}^+ - v_k a_{-k\downarrow}^+ \\ a_{-k\downarrow} &= u_k \beta_{-k} - v_k \alpha_k^+ & \beta_{-k}^+ &= u_k a_{-k\downarrow}^+ + v_k a_{k\uparrow} \end{aligned}$$

com as propriedades $\{a_k, a_{k'}^+\} = \delta_{kk'}$ e $\{\alpha_k, \alpha_{k'}^+\} = \delta_{kk'}$,

e o Teorema de Wick ⁽¹¹⁾ para efetuarmos a diagonalização do Hamiltoniano.

Pelo Teorema de Wick

$$a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow} = N(a_{k\downarrow}^+ a_{k'\downarrow}) + \underbrace{a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow}}$$

Onde N representa a ordenação normal dos operadores $a_{k\uparrow}^+$ e $a_{k'\uparrow}$ em relação aos operadores α e β .

Seja $|0\rangle$ o vácuo em relação a α e β então $\alpha_k |0\rangle = \beta_{-k} |0\rangle = 0$ bem como $\langle 0 | \alpha_k^+ = \langle 0 | \beta_{-k}^+ = 0$
 e $\langle 0 | a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow} |0\rangle = \langle 0 | N(a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow}) |0\rangle + \underbrace{a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow}}$

Como $\langle 0 | N(a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow}) |0\rangle = 0$ então

$$\langle 0 | a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow} |0\rangle = \underbrace{a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow}} \quad \text{onde}$$

$a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow}$ é a chamada contração dos operadores é um número

$$\langle 0 | a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow} |0\rangle = \langle 0 | (\mu_k \alpha_k^+ + \nu_k \beta_{-k}^+) (\mu_{k'} \alpha_{k'} + \nu_{k'} \beta_{-k'}) |0\rangle$$

$$\langle 0 | a_{k\uparrow}^+ a_{k'\uparrow} |0\rangle = \nu_k^2 \delta_{kk'}$$

Podemos transformar o termo de energia cinética de III-7 usando o Teorema de Wick.

$$\begin{aligned} \sum_k \epsilon_k (a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} + \underline{a_{k\downarrow}^+ a_{k\downarrow}}) &= \\ &= \sum_k \epsilon_k [(N(a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow}) + N(\underline{a_{k\downarrow}^+ a_{k\downarrow}}) + \underbrace{a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow}} + \underbrace{\underline{a_{k\downarrow}^+ a_{k\downarrow}}}] \end{aligned}$$

$$\text{onde } N(a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow}) = N [(\mu_k \alpha_k^+ + \nu_k \beta_{-k}^+) (\mu_k \alpha_k + \nu_k \beta_{-k})]$$

$$\begin{aligned} N(a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow}) &= \mu_k^2 \alpha_k^+ \alpha_k + \mu_k \nu_k \beta_{-k} \alpha_k + \mu_k \nu_k \alpha_k^+ \beta_{-k} + \\ &\quad - \nu_k^2 \beta_{-k}^+ \beta_{-k} \end{aligned}$$

$$N(a_{-k\downarrow}^+ a_{-k\downarrow}) = N [(\mu_k \beta_{-k}^+ - v_k \alpha_k) (\mu_k \beta_{-k} - v_k \alpha_k^+)]$$

$$= \mu_k^2 \beta_{-k}^+ \beta_{-k} - v_k^2 \alpha_k^+ \alpha_k + \mu_k v_k \beta_{-k} \alpha_k + \mu_k v_k \alpha_k^+ \beta_{-k}^+$$

$$\underbrace{a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow}} = v_k^2$$

$$\underbrace{a_{-k\downarrow}^+ a_{-k\downarrow}} = v_k^2$$

$$\sum_k \varepsilon_k (a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow} + a_{-k\downarrow}^+ a_{-k\downarrow}) \quad \text{fica}$$

$$= \sum_k \varepsilon_k [2v_k^2 + (\mu_k^2 - v_k^2) (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_{-k}^+ \beta_{-k}) + 2\mu_k v_k (\alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \beta_{-k} \alpha_k)]$$

A energia cinética dos pares possui três tipos de termos:

- 1) Um termo constante que contribui para o estado fundamental
- 2) Um termo diagonal em $\alpha_k^+ \alpha_k$ e $\beta_{-k}^+ \beta_{-k}$
- 3) Um termo não diagonal em $\alpha_k^+ \beta_{-k}^+$ e $\beta_{-k} \alpha_k$

Consideremos o termo de interação

$$-\sum_{kk'q} M_{kk'q} a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+ a_{-k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}$$

Pelo Teorema de Wick podemos escrever o produto dos quatro operadores:

$$\begin{aligned}
& a_{k\uparrow}^+ a_{k\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow} = N(a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}) + \\
& + N(a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}) + N(a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}) + \\
& + N(a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}) + N(a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}) + \\
& + N(a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}) + N(a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}) \\
& + a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow} + a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow} + \\
& + a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}
\end{aligned}$$

$$\text{Como } a_{k\uparrow}^+ a_{k'-q\downarrow} = a_{k'\downarrow}^+ a_{k+q\uparrow} = a_{k'\downarrow}^+ a_{k+q\uparrow} = 0$$

então

$$\begin{aligned}
& a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow} = N(a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}) + \\
& + \delta_{q,0} v_k^2 N(a_{k\downarrow}^+ a_{k'\downarrow}) + \delta_{q,0} v_{k'}^2 N(a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow}) + \\
& + \delta_{kk'} \mu_k v_k N(a_{k-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}) + \delta_{kk'} \mu_{k+q} v_{k+q} N(a_{k\uparrow}^+ a_{k\uparrow}) \\
& + \delta_{kk'} \mu_k v_k \mu_{k+q} v_{k+q} + \delta_{q,0} v_{k'}^2 v_k \quad \text{ou} \\
& = N(a_{k\uparrow}^+ a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}) + v_k^2 N(a_{k\downarrow}^+ a_{k\downarrow}) + v_{k'}^2 v_k^2
\end{aligned}$$

$$+ \mu_k, \nu_k, N(\underline{a}_{k\downarrow} a_{k\uparrow}) + \mu_k, \nu_k, N(a_{k\uparrow}^+ \underline{a}_{k\downarrow}^+) + \mu_k, \nu_k, \mu_k \nu_k$$

$$+ \nu_k^2, N(\underline{a}_{k\downarrow}^+ \underline{a}_{k\downarrow})$$

$$\text{onde } N(a_{k\uparrow}^+ a_k) = \mu_k^2 \alpha_k^+ \alpha_k - \nu_k^2 \beta_{-k}^+ \beta_{-k} +$$

$$+ \mu_k \nu_k \beta_{-k} \alpha_k + \mu_k \nu_k \alpha_k^+ \beta_{-k}^+$$

$$N(\underline{a}_{k\downarrow}^+ \underline{a}_{k\downarrow}) = \mu_k^2 \alpha_k^+ \alpha_k - \nu_k^2 \beta_{-k}^+ \beta_{-k} + \mu_k \nu_k \alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \mu_k \nu_k \beta_{-k} \alpha_k$$

$$N(\underline{a}_{k\downarrow} a_k) = \mu_k^2 \beta_{-k} \alpha_k - \mu_k \nu_k \beta_{-k}^+ \beta_{-k} - \mu_k \nu_k \alpha_k^+ \alpha_k - \nu_k^2 \alpha_k^+ \beta_{-k}^+$$

$$N(a_{k\uparrow}^+ \underline{a}_{k\downarrow}) = \mu_k^2 \alpha_k^+ \beta_{-k}^+ - \mu_k \nu_k \alpha_k^+ \alpha_k - \mu_k \nu_k \beta_{-k}^+ \beta_{-k} - \nu_k^2 \beta_{-k} \alpha_k$$

$$\text{então } a_{k\uparrow}^+ \underline{a}_{k\downarrow}^+ \underline{a}_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow} =$$

$$= N(a_{k\uparrow}^+ \underline{a}_{k\downarrow}^+ \underline{a}_{k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow}) +$$

$$+ \delta_{q,0} \{ \nu_k^2, [\nu_k^2 + (\mu_k^2 - \nu_k^2) (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_{-k}^+ \beta_{-k}) + 2\mu_k \nu_k (\alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \beta_{-k} \alpha_k)] \}$$

$$+ \mu_k, \nu_k, \{ \mu_k \nu_k - 2\mu_k \nu_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_{-k}^+ \beta_{-k}) + (\mu_k^2 - \nu_k^2) (\alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \beta_{-k} \alpha_k) \}$$

Podemos escrever o Hamiltoniano como:

$$\sum_k \xi_k [2\nu_k^2 + (\mu_k^2 - \nu_k^2) (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_{-k}^+ \beta_{-k}) + 2\mu_k \nu_k (\alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \beta_{-k} \alpha_k)]$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_k \sum_{k'} \sum_q \delta_{q,0} M_{kk',q} \{v_k^2 + (\mu_k^2 - v_k^2)(\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_{-k}^+ \beta_{-k}) + \\
& + 2\mu_k v_k (\alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \beta_{-k} \alpha_k)\} \\
& + \sum_k \sum_{k'} M_{kk',q} \{\mu_k v_k [\mu_k v_k - 2\mu_k v_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_{-k}^+ \beta_{-k}) + \\
& (\mu_k^2 - v_k^2)(\alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \beta_{-k} \alpha_k)]\}
\end{aligned}$$

Podemos escrever o Hamiltoniano como a soma

$$H = U + H_1 + H_2$$

onde

$$U = 2 \sum_k \xi_k v_k^2 - \sum_{kk'} \delta_{q,0} M_{kk',q} v_k^2 v_{k'}^2 - \sum_k \sum_{k'} M_{kk',q} \mu_k v_k \mu_{k'} v_{k'}$$

$$H_1 = \sum_k \xi_k (\mu_k^2 - v_k^2) (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_{-k}^+ \beta_{-k}) - \sum_k \sum_{k'} \sum_q \delta_{q,0} M_{kk',q} v_k^2 \times$$

$$\times (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_{-k}^+ \beta_{-k}) + \sum_k \sum_{k'} M_{kk'} \mu_k v_k 2\mu_{k'} v_{k'} (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_{-k}^+ \beta_{-k})$$

$$H_2 = \sum_k 2\xi_k \mu_k v_k (\alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \beta_{-k} \alpha_k) - \sum_{kk'} \delta_{q,0} M_{kk',q} v_k^2 2\mu_k v_k \times$$

$$\times (\alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \beta_{-k} \alpha_k)$$

$$- \sum_k \sum_{k'} M_{kk'} \mu_k v_k (\mu_k^2 - v_k^2) (\alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \beta_{-k} \alpha_k)$$

O termo $N(a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+ a_{-k'-q\downarrow} a_{k+q\uparrow})$ não contribui para o ground-state do sistema $\langle 0|N(V)|0 \rangle = 0$, por isso não foi incluído no Hamiltoniano.

Considerando que o sistema é eletricamente neutro. Isto implica que $q \neq 0$ e teremos

$$U = 2 \sum_k (\varepsilon_k) v_k^2 - \sum_k \sum_{k'} M_{kk'} \mu_k v_{k'} \mu_k v_k$$

$$H_1 = \sum_k [(\varepsilon_k) (\mu_k^2 - v_k^2) + \sum_{k'} M_{kk'} \mu_k v_{k'} 2\mu_k v_k] (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_{-k}^+ \beta_{-k})$$

$$H_2 = \sum_k [2\mu_k v_k (\varepsilon_k) - \sum_{k'} M_{kk'} \mu_k v_{k'} (\mu_k^2 - v_k^2)] (\alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \beta_{-k} \alpha_k)$$

$$\text{Seja } \Delta_k = \sum_{k'} M_{kk'q} \mu_{k'} v_{k'}$$

Teremos então $H = U + H_1 + H_2$

$$U = 2 \sum_k \varepsilon_k v_k^2 - \sum_k \mu_k v_k \Delta_k$$

$$H_1 = \sum_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_{-k}^+ \beta_{-k}) [(\mu_k^2 - v_k^2) \varepsilon_k + 2\mu_k v_k \Delta_k]$$

$$H_2 = \sum_k (\alpha_k^+ \beta_{-k}^+ + \beta_{-k} \alpha_k) [2\mu_k v_k \varepsilon_k - (\mu_k^2 - v_k^2) \Delta_k]$$

Onde:

- 1) U é o termo que representa o ground-state do Hamiltoniano.
- 2) H_1 é o termo que dá a energia de excitação das quasi-partículas.
- 3) H_2 é um termo não diagonal.

Para diagonalizar o Hamiltoniano ajustaremos μ_k e v_k de modo a anular o termo H_2 . Teremos então

$$2\varepsilon_k \mu_k v_k = \Delta_k (\mu_k^2 - v_k^2) \quad \text{como} \quad \mu_k^2 + v_k^2 = 1$$

$$\mu_k = \cos\theta_k \quad \nu_k = \sin\theta_k$$

$$\xi_k \sin 2\theta_k = \Delta_k \cos 2\theta_k$$

$$\operatorname{tg} 2\theta_k = \frac{\Delta_k}{\xi_k} \quad \sin 2\theta_k = \pm \frac{\Delta_k}{E_k} = 2\mu_k \nu_k$$

$$\cos 2\theta_k = \frac{\xi_k}{E_k} \quad \text{onde} \quad E_k = \sqrt{\Delta_k^2 + \xi_k^2}$$

$$H_1 = \pm \sum_k E_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \beta_k^+ \beta_k) \quad (\text{III-8})$$

$E_k = \sqrt{\Delta_k^2 + \xi_k^2}$ representa a contribuição adicional de cada quasi-partícula. Podemos notar que $E_k > \Delta_k$ ou seja existe um gap Δ_k que separa os estados excitados do estado fundamental. Escolheremos o sinal positivo para a equação III-8 que descreve o espectro de energias acima do estado fundamental.

$$\mu_k \nu_k = \frac{\Delta_k}{E_k} \quad \mu_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{E_k}\right) \quad \text{e} \quad \nu_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k}\right)$$

A equação do gap torna-se

$$\Delta_k = \sum_{k'} M_{kk',q} \mu_{k'} \nu_{k'}$$

$$\Delta_k = \sum_{k'} \frac{1}{2} M_{kk',q} \frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}} \quad \text{ou}$$

$$2\xi_k \mu_k \nu_k = (\mu_k^2 - \nu_k^2) \frac{1}{2} \sum_{k'} M_{kk',q} \frac{\Delta_{k'}}{E_{k'}}$$

$$2\varepsilon_k \mu_k \nu_k = (\mu_k^2 - \nu_k^2) \sum_{k'} M_{kk',q} \mu_{k'} \nu_{k'}$$

A equação de gap obtida é idêntica a BCS, porém o elemento de matriz de interação é diferente.

$$\text{Como } M_{kk',q} = \left\| \left\{ \frac{\epsilon_q^2}{(\epsilon_k - \epsilon_{k-q})^2 - \epsilon_q^2} \right\} V_q^2 \gamma^2 \right\| \approx \frac{V_q^2 \gamma^2}{E_{k+q} + E_k + \epsilon_p + \epsilon_{p+q}}$$

e $\gamma = \sum_p (\mu_{p+q} v_p - v_{p+q} \mu_p)$ podemos escrever a equação do gap como:

$$2\epsilon_k \mu_k v_k = \frac{\mu_k^2 - v_k^2}{(2\pi)^6} \int \frac{V_q^2 \gamma^2}{(E_{k+q} + E_k + \epsilon_p + \epsilon_{p+q})} \mu_{k+q} v_{k+q} d_q d_q$$

(III-9)

No Capítulo seguinte resolveremos a equação integral do gap e calcularemos a temperatura crítica do Ge.

CAPÍTULO IV

CÁLCULO DA TEMPERATURA CRÍTICA

Em analogia a Teoria BCS obteremos a temperatura crítica T_c a partir da função gap. Na teoria BCS a solução da equação integral do gap é obtida supondo-se que o potencial de interação elétron-fonon seja um potencial médio que apresente um corte na energia de Debye.

O potencial de interação do mecanismo elétron-quanta de polarização em nosso modelo é $\gamma'V_q$. Para resolvermos a equação integral III-8, consideraremos a média sobre q^2 (interação Coulombiana), que será truncada no valor do raio efetivo de blindagem do semiconductor. A interação com a luz sofrerá um corte em $\hbar\tilde{\omega}$ que é a energia máxima dos quanta de polarização. Será feita a aproximação $\lambda(0)/\hbar\tilde{\omega} \ll 1$ que garante a validade da analogia com a Teoria B.C.S. Com estas considerações a solução de III-8 nos dará a função gap.

$$\Delta = 2 \hbar\tilde{\omega} \exp \left\{ - \frac{1}{F(\lambda(0), \omega)} \right\} \quad (\text{III-9}) \quad \text{onde}$$

$\hbar\tilde{\omega}$ é a energia máxima dos quanta de polarização

$$F(\lambda(0), \omega) = \frac{N(0) \overline{D_q^2}}{2 \hbar\tilde{\omega}} \quad (\text{III-10})$$

$N(0)$ = é a densidade de estados de elétrons k na superfície de Fermi.

$\overline{D_q^2}$ = é o valor médio de D_q^2 sobre q^2 .

Consideremos a equação integral III-8

$$2 \int_k \mu_k \nu_k = \frac{\mu_k^2 - \nu_k^2}{(2\pi)^6} \int \frac{\gamma^2 v_q^2 \mu_{k+q} \nu_{k+q} d\vec{p} d\vec{q}}{(E_{k+q} + E_k + \epsilon_p + \epsilon_{p+q})}$$

$$\text{onde } \gamma^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{\lambda(p+q)}{\epsilon_{p+q}} - \frac{\lambda(p)}{\epsilon_p} \right)^2 \quad (\text{veja apêndice B})$$

supondo $\lambda(p) = \lambda(0)$ ou seja $\lambda(p)$ depende fracamente de p e considerando que $\epsilon_p = \frac{\hbar\tilde{\omega}}{2} + \frac{\hbar^2 p^2}{2 m_p}$ podemos escrever

$$\gamma^2 = \left(\frac{\lambda(0) m_p \vec{q}}{\hbar^2} \right)^2 \left[\frac{q^2 + 4pq \cos\theta + 4p^2 \cos^2\theta}{(p^2 + p_0^2)^2 (p^2 + p_0^2 + 2pq \cos\theta + q^2)^2} \right]$$

$$\text{onde } p_0 = \left(\frac{m_p \tilde{\omega}}{\hbar} \right)^{1/2}$$

A equação integral (III-8) pode ser reescrita como:

$$2 \int_k \mu_k \nu_k = \frac{\mu_k^2 - \nu_k^2}{(2\pi)^3} \int \frac{D_q^2 \mu_{k+q} \nu_{k+q}}{(\hbar\tilde{\omega} + E_{k+q} + E_k)} d\vec{q} \quad (\text{III-11})$$

$$\text{onde } D_q^2 = \frac{v_q^2}{(2\pi)^3} \left(\frac{\lambda(0) m_p \vec{q}}{\hbar^2} \right)^2 (\hbar\tilde{\omega} + E_k + E_{kq}) \int \phi(\vec{p}, \vec{q}) d\vec{p}$$

(III-12)

$$\int \phi(\vec{p}, \vec{q}) d\vec{p} = \int \frac{(4p^4 \cos^2\theta + 4p^3q \cos\theta + p^2q^2) \text{sen}\theta d\theta d\phi dp}{(\hbar\bar{\omega} + E_{k+q} + E_k + \frac{\hbar^2 p^2}{2m_p} + \frac{\hbar^2 pq \cos\theta + \hbar^2 q^2}{2m_p}) (p^2 + p_0^2)^2 (p^2 + p_0^2 + q^2 + 2pq \cos\theta)^2}$$

(III-13)

Como $p_0 \approx 10^{-7} \text{ cm}^{-1}$ e $q_0 \approx 10 \text{ cm}^{-1}$ para concentrações da ordem de 10^{18} cm^{-3} podemos desprezar os termos q^2 e q no denominador frente aos termos p tendo em vista que a interação será truncada nos valores p_0 e q_0 .

Com estas considerações III-13 fica

$$\int \phi(\vec{p}, \vec{q}) d\vec{p} = \int \frac{(4p^4 \cos^2\theta + 4p^3q \cos\theta + p^2q^2) \text{sen}\theta d\theta d\phi dp}{(\hbar\bar{\omega} + E_{k+q} + E_k + \frac{\hbar^2 p^2}{m_p}) (p^2 + p_0^2)^4}$$

$$\text{como } \hbar\bar{\omega} + E_k + E_{k+q} + \frac{\hbar^2 p^2}{m_p} \approx \hbar\bar{\omega} + \frac{\hbar^2 p^2}{m_p}$$

$$\int \phi(\vec{p}, \vec{q}) d\vec{p} = \frac{m_p}{\hbar^2} \int \frac{(4p^4 + 4p^3q \cos\theta + p^2q^2) \text{sen}\theta d\theta d\phi dp}{(p^2 + p_0^2)^5}$$

Considerando que para semicondutores $R = \frac{e^4 m_p}{\hbar^2 \chi^2}$ e $a_0 = \frac{\hbar^2 x}{e^2 m_p}$ podemos reescrever III-12 como

$$D_q^2 = \frac{2}{\pi} \frac{q^2}{(q^2 + q_0^2)^2} \left(\frac{R}{\hbar\bar{\omega}}\right)^{1/2} \left(\frac{\lambda(0)}{\hbar\bar{\omega}}\right)^2 \frac{e^2}{x} p_0^5 \hbar\bar{\omega} \int \phi(\vec{p}, \vec{q}) d\vec{p}$$

A integral III-13 pode ser dividida em três parcelas

$$1) \int \frac{4p^4 \cos^2 \theta \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dp}{(p^2 + p_0^2)^5} = \frac{\pi^2}{32p_0^5}$$

$$2) \int \frac{4p^3 q \cos \theta \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dp}{(p^2 + p_0^2)^5} = 0$$

$$3) \int \frac{p^2 q^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dp}{(p^2 + p_0^2)^5} \propto \frac{1}{p_0^7}$$

Desprezando a última parcela de III-13 podemos descrever III-12 como:

$$D_q^2 = \frac{2}{\pi} \frac{q^2}{(q_0^2 + q^2)^2} \left(\frac{R}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^{1/2} \left(\frac{\lambda(0)}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^2 \frac{e^2}{x} p_0^5 \hbar\tilde{\omega} \left(\frac{\pi^2}{32 p_0^5}\right)$$

ou

$$D_q^2 = \frac{\pi}{16} \left(\frac{R}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^{1/2} \left(\frac{\lambda(0)}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^2 \frac{e^2}{x} \hbar\tilde{\omega} \frac{q^2}{(q^2 + q_0^2)^2}$$

Determinemos $\overline{D_q^2}$ que é a média sobre q^2 de D_q^2

$$\overline{D_q^2} = \frac{\pi}{16} \left(\frac{R}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^{1/2} \left(\frac{\lambda(0)}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^2 \frac{e^2}{x} \hbar\tilde{\omega} \frac{1}{4k_F^2} \int_0^{4k_F} \frac{q^2}{(q^2 + q_0^2)} d(q^2)$$

$$\overline{D_q^2} = \frac{\pi}{16} \left(\frac{R}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^{1/2} \left(\frac{\lambda(0)}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^2 \frac{e^2}{x} \frac{\hbar\tilde{\omega}}{4(3\pi^2)^{2/3} n^{2/3}} \left[\ln(1 + \pi^2 a_0 n^{1/3}) - \frac{\pi^2 a_0 n^{1/3}}{1 + \pi^2 a_0 n^{1/3}} \right]$$

Lembrando que $N(o) = \frac{g(\epsilon)}{2\pi^2} \left(\frac{2 m_k}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left(\frac{\hbar^2}{2m_k} \right)^{1/2} (3\pi^2)^{1/3} n^{1/3}$

onde $g(\epsilon)$ é o fator de degenerescência.

$$N(o) = \frac{g(\epsilon)}{\pi^2} \left(\frac{m_k}{\hbar^2} \right) (3\pi^2)^{1/3} n^{1/3}$$

Podemos agora escrever III-10 em função de $N(o)$ e de $\overline{D_q^2}$.

$$F(\lambda(o), \omega) = \frac{g(\epsilon)}{128\pi^2} \left(\frac{R}{\hbar\tilde{\omega}} \right)^{1/2} \left(\frac{\lambda(o)}{\hbar\tilde{\omega}} \right)^2 \frac{1}{a_o n^{1/3}} \left[\ln(1 + \pi^2 a_o n^{1/3}) - \frac{\pi^2 a_o n^{1/3}}{1 + \pi^2 a_o n^{1/3}} \right]$$

Podemos agora determinar a temperatura crítica usando parâmetros dos Ge.

Para o Ge $x = 16$ $g(\epsilon) = 6$

$$R = 0.05 \text{ eV} \quad a_o = 1,0 \times 10^{-6} \text{ cm}$$

Consideremos concentrações $n \approx 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ e

$$\hbar\tilde{\omega} \sim 0.1 \text{ eV} \text{ a } 0.01 \text{ eV}$$

$$\lambda^2(\dot{0}) = e^2 A_o^2 \frac{|\langle u_{cp} | \hat{p} | u_{vp} \rangle|^2}{4 m^2} \quad \text{segundo Mass, Burrell e Ellis (12)}$$

$$\frac{|\langle u_{cp} | \hat{p} | u_{vp} \rangle|^2}{m^2} = \frac{E_g}{2m} \quad \text{então}$$

$$\lambda^2(o) = \frac{e^2 A_o^2 E_g}{8 m} \quad E_g \text{ para o Ge } \approx 0,8 \text{ eV}$$

A_o pode ser determinado em função da intensidade do campo elétrico da luz do campo de laser e da frequência da luz.

$$\text{Para } E \approx 2 \times 10^7 \text{ V/m} \quad e \quad \hbar\tilde{\omega} \sim 0.1 \text{ eV}$$

$$e \quad E \approx 2 \times 10^8 \text{ V/m} \quad e \quad \hbar\tilde{\omega} \approx 0.01 \text{ eV}$$

obtêm-se a razão $\left(\frac{\lambda(o)}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^2 \approx 10^{-1}$

$$e \quad F(\lambda(o), \omega) \approx 1,7 \times 10^{-3} \sim 5,3 \times 10^{-4}$$

Considerando-se que para este caso a equação de gap ainda forneça resultados aceitáveis poderemos determinar T_c pela equação de gap

$$T_c \approx (2400^\circ\text{K}) e^{-\frac{1}{F(\lambda(o), \omega)}}$$

Para estes valores obteremos $T_c \approx 0^\circ\text{K}$.

Não obtivemos, portanto, temperaturas críticas e elevadas na região de validade da analogia do nosso modelo com o modelo BCS.

No Capítulo seguinte discutiremos as aproximações envolvidas.

CAPÍTULO V

CONCLUSÃO

No nosso modelo consideramos um mecanismo de supercondução devido a troca virtual de quantas de polarização com os elétrons de condução.

Mostramos que o Hamiltoniano que representa o sistema pode, através da transformação de Fröhlich apresentar em segunda ordem de teoria de perturbação, um termo de interação atrativa entre os elétrons dando origem a pares de Cooper. Mostramos também que é possível diagonalizar o Hamiltoniano do sistema através de uma transformação de Bogolyubov e determinar a função gap de energia.

Ao determinarmos a função gap de energia consideramos a aproximação $\lambda(0)/\hbar\omega \ll 1$. Os valores do parâmetro $\lambda(0)$ podem ser ajustados pela intensidade da luz do Laser. Os valores de $\hbar\omega$ estão limitados a valores não muito próximos a ressonância. Para valores de $\hbar\omega \approx 0$ ou seja na região de ressonância não ocorre transição para fase supercondutora.

A função gap obtida leva a crer que para região $\lambda(0)/\hbar\omega > 1$ pode ocorrer transição para fase supercondutora em temperaturas elevadas. Nesse limite, contudo, a analogia estabelecida com a teoria BCS não é mais válida e nada podemos concluir.

No nosso modelo devido a ausência de dados experimentais, não foi possível estabelecer um potencial médio constante que facilita a determinação da função gap como no mecanismo BCS.

Encontramos como alternativa uma aproximação que nos possibilitou a solução da equação integral dentro da região de validade com a analogia estabelecida com o modelo BCS ($\lambda(0)/\hbar\omega \ll 1$). Nessa região não encontramos temperaturas críticas elevadas.

Podemos concluir a partir do nosso trabalho que existe um mecanismo de supercondução devido a troca virtual de quantas de polarização com os elétrons de condução, gerando pares de Cooper. E que na região de validade da aproximação utilizada encontramos temperaturas de transição da ordem de 0°K .

Fica porém em aberto a solução da equação de gap para a região próxima a ressonância.

APÊNDICE A

MUDANÇA DE REPRESENTAÇÃO POR TRANSFORMAÇÕES UNITÁRIAS

Consideremos a transformação unitária $U^+U = 1$ e $U^+ = U^{-1}$ e o conjunto de funções de estado $|\phi\rangle$ e $|\psi\rangle$ que satisfazem

$$H|\phi\rangle = ih \frac{\partial}{\partial t} |\phi\rangle \quad \text{A-1}$$

$$H'|\psi\rangle = ih \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \quad \text{A-2}$$

onde $|\psi\rangle = U|\phi\rangle$

Podemos então escrever A-1 como

$$HU|\phi\rangle = ih \frac{\partial U}{\partial t} |\psi\rangle + ih U \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle$$

multiplicando pela esquerda por U^{-1} teremos

$$U^{-1}HU|\psi\rangle = ih U^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U|\psi\rangle + ih \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle \quad \text{ou}$$

$$H' = U^{-1}HU - ih U^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U \quad \text{A-3}$$

onde H' é o Hamiltoniano do conjunto de outros estados $|\psi\rangle$ e $|\psi\rangle = U^{-1}|\phi\rangle$

Como vimos, podemos passar de uma representação do Hamiltoniano para outra através da aplicação de transformações unitárias.

APÊNDICE B

CÁLCULO DE $\gamma_q^2(q)$

Para determinarmos a expressão $\gamma_q^2(p)$ usaremos as relações obtidas na secção II-2

$$u_p^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_p}{E_p}\right)^2 \quad v_p^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_p}{E_p}\right)^2$$

Substituindo em $\gamma_q(p) = (u_{p+q} v_p - u_p v_{p+q})^2$ teremos

$$\gamma_q^2(p) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_p \xi_{p+q} + \lambda(p) \lambda(p+q)}{\sqrt{\xi_p^2 + \lambda^2(p)} \sqrt{\xi_{p+q}^2 + \lambda^2(p+q)}}\right)^2 \quad \text{ou}$$

$$\gamma_q^2(p) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\lambda(p)}{\xi_p}\right)^2} \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda(p+q)}{\xi_{p+q}}\right)^2}} + \frac{\frac{\lambda(p)}{\xi_p} \frac{\lambda(p+q)}{\xi_{p+q}}}{\sqrt{1 + \left(\frac{\lambda(p)}{\xi_p}\right)^2} \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda(p+q)}{\xi_{p+q}}\right)^2}}\right)^2 \quad (\text{B-1})$$

$$\text{Como } \xi_p = \frac{h\bar{\omega}}{2} + \frac{h^2 p^2}{2 mp} \quad (\text{B-2}) \quad \text{e } \xi_p \approx h\bar{\omega}$$

$$\text{Consideremos } \left(\frac{\lambda(p)}{\xi_p}\right)^2 \approx \left(\frac{\lambda(p)}{h\bar{\omega}}\right)^2 \ll 1$$

Podemos então usar a expansão binomial

$$(1 + x)^{-1/2} = 1 - \frac{1}{2} x + \dots \quad \text{para } x \ll 1$$

e obteremos

$$\gamma_q^2(p) = \frac{1}{4} \left(\frac{\lambda(p+q)}{\xi_{p+q}} - \frac{\lambda(p)}{\xi_p} \right)^2 \quad (\text{B-3})$$

Considerando que o elemento de matriz dependa fracamente de p ou seja $\lambda(p) \approx \lambda(o)$ e substituindo (B-2) em (B-3) obtemos

$$\gamma_q^2(p) = \left(\frac{\lambda(o) m_p \vec{q}}{h^2} \right)^2 \left[\frac{q^2 + 4pq \cos \theta + 4p^2 \cos^2 \theta}{(p^2 + p_o^2)^2 (p^2 + p_o^2 + q^2 + 2pq \cos \theta)^2} \right]$$

BIBLIOGRAFIA

1. A. Bohr; B.R. Mottelson & D. Pines, Phys. Rev., 110:936 (1958).
2. G. Baym, Nature, 224: 872 (1969).
3. P.W. Anderson & W. Brinkman, Phys. Rev. Lett., 30, 1108 (1973).
4. Taylor, Phylip L., A quantum Approach to Solid State, in "Flux quantization and Josephson effect", p. 228, Prentice Hall, New Jersey, 1970.
5. J. Bardeen; L.N. Cooper & J.R. Schrieffer, Phys. Rev. 108: 1175 (1957).
6. V.D. Blazhin & A.S. Selivanenko, Sov. Phys. - Jept., 12: 2610 (1971).
7. N.N. Bogolyubov, Sov. Phys. - Jept., 7: (1958).
8. Taylor, Phylip L., A quantum Approach to Solid State, in "The Frölich Hamiltonian", p. 176, Prentice Hall, New Jersey, 1970.
9. Taylor, Phylip L., A Quantum Approach to Solid State, in "The Attractive Interaction Between Eletrons", p. 186, Prentice Hall, New Jersey, 1970.
10. Fetter, Alexander L. & Walecka, John Dirk, Quantum Theory of Many - Particle Systems, in "Interaction Fermi gas" p. 327, McGraw-Hill, New York, 1971.
11. Fetter, Alexandre L. & Walecka, John Dirk, Quantum Theory of Many - Particle Systems, in "Wick's Theorem", p. 83, McGraw-Hill, New York, 1971.
12. T.S. Mass, G.J. Burrell & B. Ellis, "Semiconductor Optical Electronics, p. 59, John Wiley, New York, 1973.