Apendice A

Cálculo variacional del formalismo BCS

Como ya discutimos en el Capítulo I, el fenómeno de superconductividad nuclear, puede entenderse como generado por fuerzas atractivas entre nucleones, las que dan lugar a la formación de pares estables acoplados a momento angular cero. De manera que el Hamiltoniano que consideraremos será:

$$H = \sum_{jm} \varepsilon_j \; a^{\dagger}_{jm} \, a_{jm} - G \sum_{\substack{j,m>0 \\ j',m'>0}} a^{\dagger}_{jm} \, a^{\dagger}_{\overline{jm}} \, a_{\overline{j'm'}} \, a_{j'm'} \qquad \text{(A-1-a)}$$

donde: $$a^{\dagger}_{\overline{jm}} = (-)^{j-m} \, a^{\dagger}_{j-m} \qquad \text{(A-1-b)}$$

Siguiendo el procedimiento de Bogoliubov , podemos realizar una transformación canónica a una nueva base de fermiones:

$$\begin{pmatrix} \alpha^{\dagger}_{jm} \\ \alpha_{\overline{jm}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_j & -V_j \\ V_j & U_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^{\dagger}_{jm} \\ a_{\overline{jm}} \end{pmatrix} \qquad \text{(A-2)}$$

donde U_j y V_j pueden ser elegidos de manera que sean reales y positivos. Imponiendo como condición que los $\alpha^{\dagger}_{jm}$ (α_{jm}) obedezcan las reglas usuales de anticonmutación para fermiones, resulta una condición adicional para los U_j y V_j:

$$U_j^2 + V_j^2 = 1 \qquad \text{(A-3)}$$

Para obviar el problema de tener en cuenta la constancia en el número de partículas, trabajaremos con:

$$\mathcal{H} = H - \lambda N \tag{A-4}$$

siendo:

$$N = \sum_{jm} a^{\dagger}_{jm} \, a_{jm} \tag{A-5}$$

y siendo "λ" un vínculo a ajustar teniendo en cuenta que el valor medio de las partículas (<N>) debe ser igual al número de partículas en el sistema.

Después de pasar a la base de cuasipartículas, y ordenar términos vía el teorema de Wick a Temperatura Finita[32] el resultado es:

$$H = H_{00} + H_{11} + H_{20} + H_{40} + H_{22} + H_{31} + H_{qp-qp} \qquad \text{(A-6-a)}$$

donde:

$$H_{00} = \sum_{jm} (\varepsilon_j - \lambda)\ 2\Omega_j \left[U_j^2 f_j + V_j^2 (1 - f_j) \right] - \Delta(T)^2/G$$

$$H_{11} = \sum_{jm} \left\{ (\varepsilon_j - \lambda) \left[U_j^2 - V_j^2 \right] + 2\, \Delta(T)\, U_j V_j \right\} |n_j|$$

$$H_{20} = \sum_{jm} \left\{ \Delta(T) \left[U_j^2 - V_j^2 \right] + 2\, (\varepsilon_j\ \lambda)\, U_j V_j \right\} (P_j^\dagger + P_j)$$

$$H_{22} = -\, (G/2) \sum_{jj'} \left[U_j^2 U_{j'}^2 + V_j^2 V_{j'}^2 \right] (P_j^\dagger P_{j'} + P_{j'}^\dagger P_j)$$

$$H_{40} = (G/2) \sum_{jj'} \left[U_j^2 V_{j'}^2 + U_j^2 V_{j'}^2 \right] (P_j^\dagger P_{j'}^\dagger + P_{j'} P_j)$$

$$H_{31} = G \sum_{jj'} \left[U_{j'}^2 - V_{j'}^2 \right] U_j V_j (|n_j| P_{j'} + P_j^\dagger |n_{j'}|)$$

$$H_{qp-qp} = -\, G \sum_{jj'} \left[U_{j'} V_{j'} U_j V_j \right] |n_j| |n_{j'}|$$

(A-6-b)

como ya vimos en el Capítulo I.

Resulta claro que H_{oo} es el valor medio de H.

Los coeficientes U_j y V_j se eligen de manera que H_{oo}, es decir la energía media del sistema, sea mínima:

$$(\delta H_{oo} / \delta U_j) = 0 \qquad \text{(A-7)}$$

De esta condición surge que:

$$2(\varepsilon_j - \lambda) U_j V_j = \Delta (U_j^2 - V_j^2) \qquad \text{(A-8)}$$

donde se definió:

$$\Delta = G \sum_j \Omega_j U_j V_j (1 - 2f_j) \qquad \text{(A-9)}$$

siendo f_j el número de ocupación térmico determinado a partir de exigir que la entropía sea máxima. Es decir:

$$f_j(T) = 1 / (1 + \exp (\beta E_j))$$

Resolviendo (A-3) y (A-8) resulta:

$$2U_j^2 = (1 + (\varepsilon_j-\lambda)/(\Delta^2+(\varepsilon_j-\lambda)^2)^{1/2}) \qquad \text{(A-10-a)}$$

$$2V_j^2 = (1 - (\varepsilon_j-\lambda)/(\Delta^2+(\varepsilon_j-\lambda)^2)^{1/2}) \qquad \text{(A-10-b)}$$

LLevando (A-10) a la expresión de la energía de cuasipartículas:

$$E_j = (\varepsilon_j - \lambda)(U_j^2 - V_j^2) + 2\Delta\, U_j V_j \qquad \text{(A-11)}$$

obtenemos:

$$E_j = (\Delta^2+(\varepsilon_j-\lambda)^2)^{1/2} \qquad \text{(A-12)}$$

La expresión (A-8) muestra además que el término H_{20} de H es idénticamente nulo.