Bogoliubov-de Gennes

1

Estudiemos el problema de la superconductividad en 1D, en un modelo de Fermi-Hubbard, esto es, fermiones con espín $\frac{1}{2}$ en un potencial periódico, descritos por un modelo de amarre fuerte. Partimos del Hamiltoniano

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma} \hat{c}_{i\sigma}$$

$$- U \sum_{i} \hat{c}^{\dagger}_{i\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{i\downarrow} \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow} \quad \text{con } U > 0.$$

Introducimos el parámetro de orden local $\Delta_i = -U \langle \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow} \rangle$ y realizamos la aproximación de campo medio. En este caso, no incluimos Hartree-Fock por simplicidad.

Entonces, tenemos que

$$-U \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \simeq \Delta_i \hat{c}^{\dagger}_{i\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{i\downarrow} + \Delta^{*}_i \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow} + \frac{|\Delta_i|^2}{U},$$

resultando el Hamiltoniano de BCS es

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{i,j} \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma} h_{ij} \hat{c}_{j\sigma} + \sum_{i} (\Delta_i \hat{c}^{\dagger}_{i\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{i\downarrow} + \Delta^{*}_i \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow})$$
$$+ \text{cte}$$

que introduciendo los espinores de Nambu

$$\hat{\Psi}_i = \begin{pmatrix} \hat{c}_{i\uparrow} \\ \hat{c}^{+}_{i\downarrow} \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad h_{ij} = -t\,\delta_{\langle i,j\rangle} - \mu\,\delta_{i,j}$$

entonces podemos escribir al Hamiltoniano de BCS como

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{i,j} \hat{\Psi}^{+}_i \cdot \begin{pmatrix} h_{ij} & \Delta_i \delta_{i,j} \\ \Delta^{*}_{ij}\delta_{i,j} & -h_{ij} \end{pmatrix} \cdot \hat{\Psi}_j + cte.$$

Ahora, introduciendo la base de espinores $\hat{\gamma}_{n\uparrow}$ y $\hat{\gamma}_{n\downarrow}$ en la que el Hamiltoniano es diagonal, esto es

$\hat{H}_{BCS} = E_0 + \sum_{n\sigma} E_{n\sigma}\,\hat{\gamma}^{+}_{n\sigma}\hat{\gamma}_{n\sigma}$, entonces buscamos la transformación unitaria

$$\hat{c}_{i\uparrow} = \sum_n \left(u_n(i)\,\hat{\gamma}_{n\uparrow} - v_n(i)\,\hat{\gamma}^{+}_{n\downarrow} \right) \quad \text{y}$$

$$\hat{c}^{+}_{i\downarrow} = \sum_n \left(u_n(i)\,\hat{\gamma}^{+}_{n\downarrow} + v_n(i)\,\hat{\gamma}_{n\uparrow} \right)$$

13

En el esquema de Heisenberg,

$$\hat{c}_{i\uparrow}(t) = \sum_n \left[u_n(i)\, \hat{\gamma}_{n\uparrow}\, e^{-iE_nt/\hbar} - v_n(i)\, \hat{\gamma}^{+}_{n\downarrow}\, e^{iE_nt/\hbar} \right)$$

y

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \hat{c}_{i\uparrow}(t)}{\partial t} = \sum_n \left(E_n u_n(i)\, \hat{\gamma}_{n\uparrow}\, e^{-iE_nt/\hbar} + E_n v_n(i)\, \hat{\gamma}^{+}_{n\downarrow}\, e^{iE_nt/\hbar} \right)}$$

de las ecuaciones de Heisenberg (ver Apéndice)

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \hat{c}_{i\uparrow}(t)}{\partial t} = [\hat{c}_{i\uparrow}(t), \hat{H}_{BCS}]}$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \hat{c}^{+}_{i\downarrow}(t)}{\partial t} = [\hat{c}^{+}_{i\downarrow}(t), \hat{H}_{BCS}]}$$

tenemos

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \hat{c}_{i\uparrow}(t)}{\partial t} = \sum_j h_{ij}\, \hat{c}_{j\uparrow}(t) + \Delta_i\, \hat{c}^{+}_{i\downarrow}(t)}$$

y

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \hat{c}^{+}_{i\downarrow}(t)}{\partial t} = -\sum_j h_{ji}\, \hat{c}^{+}_{j\downarrow}(t) - \Delta_i\, \hat{c}_{i\uparrow}(t)}$$

Enfocándonos en las ecuaciones en verde

$$\sum_j h_{ij} \sum_n \left(u_n(j)\, \hat{\gamma}_{n\uparrow}\, e^{-iE_nt/\hbar} - v_n(j)\, \hat{\gamma}^{+}_{n\downarrow}\, e^{iE_nt/\hbar} \right)$$

$$+ \Delta_i \sum_n \left(u_n(i)\, \hat{\gamma}^{+}_{n\downarrow}\, e^{iE_nt/\hbar} + v_n(i)\, \hat{\gamma}_{n\uparrow}\, e^{-iE_nt/\hbar} \right)$$

Entonces tenemos las siguientes

$$E_n U_n(i) = \sum_j h_{ij} U_n(j) + \Delta_i V_n(i)$$

$$E_n V_n(i) = -\sum_j h_{ij} V_n(i) + \Delta_i U_n(i)$$

la cual se puede arreglar de forma matricial como

$$E_n \begin{pmatrix} U_n(j) \\ V_n(i) \end{pmatrix} = \sum_j \begin{pmatrix} h_{ij} & \Delta_i \delta_{ij} \\ \Delta_i \delta_{ij} & -h_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_n(j) \\ V_n(j) \end{pmatrix}.$$

que es la ecuación de eigenvalores

Por otro lado, de las expresiones en marcado tenemos que

$$i\hbar \frac{\partial C^{\dagger}_{i\downarrow}(t)}{\partial t} =$$

$$= \sum_n \left(-E_n U_n(i) \hat{\gamma}^{\dagger}_{nj} e^{iE_n t/\hbar} + E_n V_n(i) \hat{\gamma}_{n\uparrow} e^{-iE_n t/\hbar}\right) =$$

$$= -\sum_j h_{ji} \sum_n \left(U_n(j) \hat{\gamma}^{\dagger}_{nj} e^{iE_n t/\hbar} + V_n(j) \hat{\gamma}_{nj} e^{-iE_n t/\hbar}\right) +$$

$$- \Delta_i \sum_n \left(U_n(i) \hat{\gamma}_{n\uparrow} e^{-iE_n t/\hbar} - V_n(i) \hat{\gamma}^{\dagger}_{nj} e^{iE_n t/\hbar}\right)$$

entonces

$$-E_n U_n(i) = \sum_j -h_{ji}\, U_n(j) + \Delta_i V_n(i)$$

$$E_n V_n(i) = \sum_j -h_{ij}\, V_n(j) - \Delta_i U_n(i) \,,$$ esto es,

de forma matricial podemos escribir:

$$-E_n \begin{pmatrix} V_n(i) \\ U_n(i) \end{pmatrix} = \sum_j \begin{pmatrix} h_{ij} & \Delta_i \\ \Delta_i & -h_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_n(j) \\ U_n(j) \end{pmatrix}$$

Vemos que las dos ecuaciones en verde y morado son similares, en el sentido que se obtienen de reemplazar

$$\left\{ \begin{pmatrix} U_n(i) \\ V_n(i) \end{pmatrix}, E_n \right\} \longrightarrow \left\{ \begin{pmatrix} V_n(i) \\ U_n(i) \end{pmatrix}, -E_n \right\}$$

Por otro lado, tenemos

$$\Delta_i = -U \langle \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow} \rangle$$

$$= \sum_{n,n'} -U \langle (U_n(i)\, \hat{\gamma}_{n\downarrow} + V_n^*(i)\, \hat{\gamma}_{n\uparrow}^\dagger)(U_{n'}(i)\, \hat{\gamma}_{n'\uparrow} - V_{n'}^*(i)\, \hat{\gamma}_{n'\downarrow}^\dagger) \rangle$$

$$= -U \sum_{n,n'} V_{n'}^*(i)\, U_n(i) \langle \hat{\gamma}_{n\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{n\uparrow} \rangle - U_n(i)\, V_{n'}^*(i) \langle \hat{\gamma}_{n\downarrow} \hat{\gamma}_{n'\downarrow}^\dagger \rangle =$$

$$= -U \sum_n v_n^*(i)\, u_n(i) \left[f(E_n) - (1 - f(E_n)) \right] =$$

$$= U \sum_n v_n^*(i)\, u_n(i) \left[1 - 2f(E_n) \right]$$

Las ecuaciones finales son

$$\boxed{\begin{aligned} E_n \begin{pmatrix} u_n(i) \\ v_n(i) \end{pmatrix} &= \sum_j \begin{pmatrix} h_{ij} & \Delta_i \delta_{ij} \\ \Delta_i \delta_{ij} & -h_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n(j) \\ v_n(j) \end{pmatrix} \\ \Delta_i &= U \sum_{\substack{n \\ \underline{E_n > 0}}} u_n(i)\, v_n^*(i)\, (1 - 2f(E_n)) \end{aligned}}$$

y

Ecuaciones de Bogoliubov - de Gennes

a) Son ecuaciones autoconsistentes, esto es, el Hamiltoniano de BdG depende de Δ_i, que a su vez depende de los eigenvectores y eigenvalores de $\hat{H}$

b) Se suman sólo sobre las excitaciones de las partículas

Mostramos un ejemplo de un código sencillo de BdG

```
function curso_bdg_convergence

N=180;
t=1.0;
mu=-1.0;
U=2.5;
Nite=50;
```

N ← número de sitios

t ← tunelaje

mu ← potencial químico

U ← interacción

Nite ← Pasos de autoconsistencia

```
h=zeros(N,N);
Delta=zeros(N,N);
delta0=rand;
for i=1:N-1
    h(i,i+1)=-t;
    h(i+1,i)=-t;


end
for i=1:N
 h(i,i)=-(mu);
  Delta(i,i)=rand;
  end
```

definimos $h_{ij} = -t\,\delta_{\langle i,j\rangle} - \mu\,\delta_{ij}$

Δ_i = número aleatorio (cualquiera)

```
for i=1:Nite
    HBdG=[h, Delta;
        Delta,  -h ];
    [V,D]=eig(HBdG);
    E=diag(D);
```

H de BdG

```
    [E,idx]=sort(E);
    V=V(:,idx);
    for n=1:2*N
        for j=1:N
            u(j,n)=V(j,n);
            v(j,n)=V(j+N,n);
        end
    end
    Delta_new=zeros(N,1);
```

se diagonaliza HBdG y se obtienen los eigenvectores y eigenvalores

```
        for j=1:N

    for n=1:2*N
            if(E(n)>0)
            Delta_new(j)=Delta_new(j)+U*u(j,n)*conj(v(j,n));
            end
        end
    end
```

se actualiza Δ_i

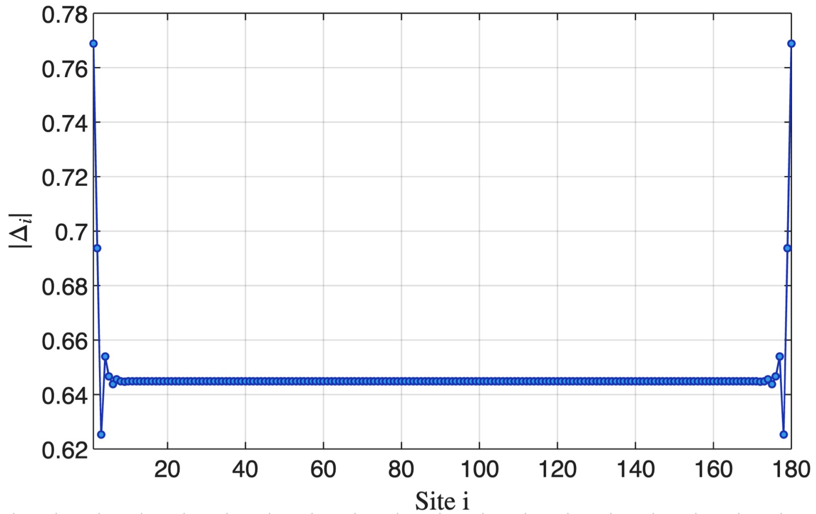
```
   for j=1:N
    Delta(j,j) = 0.1*Delta(j,j) + 0.9*Delta_new(j);
end

    as(i)=real(sum(diag(Delta)))/N;
end
```

bloque de autoconsistencia

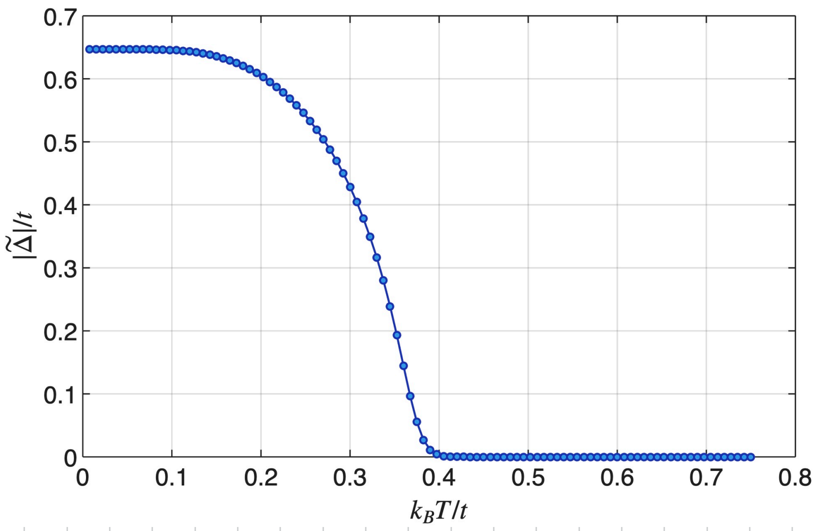
se inicia con un vector $\Delta_i^{(0)}$ donde el superíndice denota el paso de la autoconsistencia

```
figure('Color','w');
plot(1:N, abs(diag(Delta)), 'o-', ...
    'LineWidth', 1.8, ...
    'MarkerSize', 6, ...
    'MarkerFaceColor', [0.2 0.6 0.9], ...
    'Color', [0.1 0.2 0.7]);
```

Graficamos el parámetro de orden como función del sitio i, usando el código de Bogoliubov de Gennes. Notamos que salvo cerca de las fronteras, el parámetro de orden es constante. Se grafica a T=0.



Parámetro de orden como función de la temperatura. La transicion de fase corresponde a una transición de segundo orden. Graficamos el promedio sobre los sitios del parámetro de orden



Apéndice

$$\left[\hat{c}_{\ell\uparrow}, \sum_{\substack{i,j\\ \sigma}} \hat{c}^\dagger_{i\sigma} h_{ij} \hat{c}_{j\sigma} + \sum_i (\Delta_i \hat{c}^\dagger_{i\uparrow}\hat{c}^\dagger_{i\downarrow} + \Delta_i^* \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow}\right] =$$

, calculando

$$\left[\hat{c}_{\ell\uparrow}, \sum_{\substack{i,j\\ \sigma}} \hat{c}^\dagger_{i\sigma} h_{ij} \hat{c}_{j\sigma}\right] = \sum_{i,j} h_{ij} \left[\hat{c}_{\ell\uparrow}, \hat{c}^\dagger_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma}\right] =$$

$$= \sum_{\substack{i,j\\ \sigma}} h_{ij} \left([\hat{c}_{\ell\uparrow}, \hat{c}^\dagger_{i\sigma}] \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}^\dagger_{i\sigma} [\hat{c}_{\ell\uparrow}, \hat{c}_{j\sigma}] \right) =$$

$$= \sum_{\substack{i,j\\ \sigma}} h_{ij} (\delta_{i\ell}\delta_{\sigma,\uparrow} - 2\hat{c}^\dagger_{i\uparrow} \hat{c}_{\ell\sigma}) \hat{c}_{j\sigma} + 2\hat{c}^\dagger_{i\sigma} \hat{c}_{\ell\uparrow} \hat{c}_{j\sigma}$$

$$= \sum_j h_{ij} \hat{c}_{j\uparrow}$$

Mientras

$$[\hat{c}_{\ell\uparrow}, \hat{c}^\dagger_{i\uparrow} \hat{c}^\dagger_{i\downarrow}] = [\hat{c}_{\ell\uparrow}, \hat{c}^\dagger_{i\uparrow}] \hat{c}^\dagger_{i\downarrow} + \hat{c}^\dagger_{i\uparrow} [\hat{c}_{\ell\uparrow}, \hat{c}^\dagger_{i\downarrow}]$$

$$= [\delta_{\ell,i} - 2\hat{c}^\dagger_{i\uparrow} \hat{c}_{\ell\uparrow}] \hat{c}^\dagger_{i\downarrow} - 2\hat{c}^\dagger_{i\uparrow} c_{\ell\uparrow} \hat{c}^\dagger_{i\downarrow}$$

$$= \delta_{\ell i} \hat{c}^\dagger_{i\downarrow}.$$

De la misma manera, calculamos

$$\left[\hat{c}^\dagger_{\ell\sigma'}, \sum_{\substack{i,j\\ \sigma}} h_{ij} \hat{c}^\dagger_{i\sigma} \hat{c}_{j\sigma}\right] =$$

$$= \sum_{\substack{i,j\\ \sigma}} h_{ij} \left([\hat{c}^\dagger_{\ell\sigma'}, \hat{c}^\dagger_{i\sigma}] \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}^\dagger_{i\sigma} [\hat{c}^\dagger_{\ell\sigma'}, \hat{c}_{j\sigma}] \right) =$$

$$= \sum_{\substack{i,j\\ \sigma}} h_{i,j} \left[2\hat{c}^\dagger_{\ell\sigma'} \hat{c}^\dagger_{i\sigma} \hat{c}_{i\sigma} + \hat{c}^\dagger_{i\sigma} (2\hat{c}^\dagger_{\ell\sigma'} \hat{c}_{i\sigma} - \delta_{j,\ell} \delta_{\sigma,\sigma'}) \right]$$

$$= -\sum_i h_{i\ell} \hat{c}^\dagger_{i\sigma'}$$

Mientras

$$[\hat{C}^{\dagger}_{l\downarrow}, \hat{C}_{i\downarrow}\hat{C}_{i\uparrow}] = [\hat{C}^{\dagger}_{l\downarrow}, \hat{C}_{i\downarrow}]\hat{C}_{i\uparrow} + \hat{C}_{i\downarrow}[\hat{C}^{\dagger}_{l\downarrow}, \hat{C}_{i\uparrow}] =$$

$$= (2\hat{C}^{\dagger}_{l\downarrow}\hat{C}_{i\downarrow} - \delta_{l,i})\hat{C}_{i\uparrow} + 2\hat{C}_{i\downarrow}\hat{C}^{\dagger}_{l\downarrow}\hat{C}_{i\uparrow}$$

$$= -\delta_{l,i}\hat{C}_{i\uparrow}$$