Pairing

Evidenze sperimentali sono

1) la differenza sistematica di energia di legame tra nuclei pari-pari e nuclei dispari
(vedi la formula delle masse)

2) Il "gap" tra stato fondamentale e primo stato eccitato, che anch'esso è diverso tra nuclei pari-pari e dispari

3) Momenti di inerzia dei nuclei deformati (vedi oltre)

La teoria BCS (dai nomi di Bardeen, Cooper e Schrieffer) assume che vi sia un'interazione specifica tra stati di "time-reversal" che non è inclusa nell'approssimazione di campo medio.

In un sistema sferico gli stati tra loro in "time-reversal" sono

$|jm\rangle$ e $|\tilde{jm}\rangle \equiv (-)^{j+m} |j-m\rangle$

In una descrizione semiclassica le orbite ad esempio $|jj\rangle$ e $|j-j\rangle$ hanno il massimo "overlap"

Interazione di "pairing" empirica : $H_{pair} = -G \sum a^+_{jm'} a^+_{\tilde{jm'}} a_{\tilde{jm}} a_{jm}$

Teoria consistente : partiamo da

$$H = \sum_{k_1 k_2} t_{k_1 k_2} a^+_{k_1} a_{k_2} + \frac{1}{4} \sum_{\substack{k_1 k_2 \\ k_3 k_4}} \bar{v}_{k_1 k_2 k_3 k_4} a^+_{k_1} a^+_{k_2} a_{k_4} a_{k_3}$$

La funzione d'onda BCS è

$$|BCS\rangle = \prod_{k>0} \left(u_k + v_k a^+_k a^+_{\tilde{k}} \right) |-\rangle$$

Mostriamo anzitutto che tale stato è normalizzato

$$\langle BCS | BCS \rangle = \prod_{kk'>0} \langle - | (u_k + v_k\, a_{\tilde{k}} a_k)(u_{k'} + v_{k'}\, a^+_{k'} a^+_{\tilde{k}'}) | - \rangle$$

L'unico contributo non nullo viene quando $k = k'$ e si ottiene

$$\langle BCS | BCS \rangle = \prod_{k>0} (u_k^2 + v_k^2)$$

Se $u_k^2 + v_k^2 = 1$ la funzione d'onda è normalizzata e u_k, v_k si possono interpretare come ampiezze di probabilità che k sia, rispettivamente, vuoto od occupato.

Lo scopo è ora minimizzare il valore di aspettazione di H con un vincolo $-\lambda N$. Infatti la funzione d'onda BCS non conserva il numero di particelle, e il vincolo serve ad avere una conservazione almeno del numero medio.

Si calcola quindi

$$\langle BCS | H - \lambda N | BCS \rangle = \langle BCS | T - \lambda N | BCS \rangle + \langle BCS | V | BCS \rangle$$

(distinguendo la parte a uno e due corpi) (*)

Calcolo della parte a un corpo, supponendo $k_1, k_2 > 0$

$$\langle BCS | a^+_{k_1} a_{k_2} | BCS \rangle = \delta(k_1 k_2) \times \prod_{l>0,\, l \neq k_1}$$

$$\langle BCS | (u_l + v_l\, a_{\tilde{l}} a_l)(u_{k_1} + v_{k_1}\, a_{\tilde{k}_1} a_{k_1})\, a^+_{k_1} a_{k_1} \times$$

$$\times (u_{k_1} + v_{k_1}\, a^+_{k_1} a^+_{\tilde{k}_1})(u_l + v_l\, a^+_l a^+_{\tilde{l}}) | BCS \rangle$$

perché nei termini $k_1 \neq k_2$ non ho ugual numero di a e a^+.

Chiamiamo $k_1 = k_2 = k$

Dato che $l \neq k$, posso scrivere

$$\prod_{l>0,\, l\neq k} \langle BCS | (u_l + v_l a_{\tilde{l}} a_l)(u_l + v_l a^\dagger_l a^\dagger_{\tilde{l}}) \times$$

$$\times (u_k + v_k a_{\tilde{k}} a_k)\, a^\dagger_k a_k\, (u_k + v_k a^\dagger_k a^\dagger_{\tilde{k}}) | BCS \rangle =$$

$$= \prod_{l>0} (u_l^2 + v_l^2)\, v_k^2 \langle BCS | a_{\tilde{k}} a_k a^\dagger_k a_k a^\dagger_k a^\dagger_{\tilde{k}} | BCS \rangle$$

$$= v_k^2$$

Da questo ricaviamo che il valore di aspettazione del numero di particelle è

$$\langle BCS | 2 \sum_{k>0} a^\dagger_k a_k | BCS \rangle = 2 \sum_{k>0} v_k^2$$

Se lo eguagliamo al numero N di particelle del sistema otteniamo la prima equazione BCS, la "number equation"

$$\boxed{2 \sum_{k>0} v_k^2 = N} \qquad (1)$$

Inoltre il valore di aspettazione utile per (*) è

$$\langle BCS | T - \lambda N | BCS \rangle = \sum_k (t_{kk} - \lambda)\, v_k^2 \qquad (**)$$

Il valore di aspettazione della parte a due corpi è tale che la somma dà

$$\langle BCS | H - \lambda N | BCS \rangle = \sum_k \left[(t_{kk} - \lambda) v_k^2 + \frac{1}{2} \sum_{k'} \bar{v}_{kk'kk'}\, v_k^2 v_{k'}^2 \right]$$

$$+ \sum_{kk'>0} \bar{v}_{k\tilde{k}k'\tilde{k}'}\, u_k v_k u_{k'} v_{k'}$$

Il calcolo di $\langle BCS | V | BCS \rangle$ è svolto a parte

Si esegue ora la variazione

$$\delta \langle BCS | H - \lambda N | BCS \rangle = 0$$

Se v_k è il parametro variazionale, $u_k = \sqrt{1-v_k^2}$, $\frac{\partial u_k}{\partial v_k} = \frac{-2v_k}{2\sqrt{1-v_k^2}} =$
$= -\frac{v_k}{u_k}$, e $\frac{d}{dv_k} = \frac{\partial}{\partial v_k} - \frac{v_k}{u_k}\frac{\partial}{\partial u_k}$

Supponiamo $k>0$. La variazione rispetto a v_k dà

$$0 = 2v_k \left(t_{kk} - \lambda + t_{\tilde k\tilde k} - \lambda \right) + \frac{1}{2} \sum_{k'} \left(\bar v_{kk'kk'} + \bar v_{\tilde k k'\tilde k k'} \right) \times$$
$$\times v_{k'}^2 \times 2v_k \times 2 + \sum_{k'>0} \bar v_{k\tilde k k'\tilde k'} \left[u_{k'}v_{k'} \left(u_k - \frac{v_k^2}{u_k} \right) \right] 2$$

dove vi sono dei fattori 2 dovuti allo scambio tra k e k'

Moltiplicando per $\frac{1}{2} u_k$,

$$0 = u_k v_k \left[\left(t_{kk}-\lambda + t_{\tilde k\tilde k}-\lambda \right) + \sum_{k'} \left(\bar v_{kk'kk'} + \bar v_{\tilde k k'\tilde k k'} \right) v_{k'}^2 \right]$$
$$+ \sum_{k'>0} \bar v_{k\tilde k k'\tilde k'} \left(u_k^2 - v_k^2 \right) u_{k'} v_{k'} \qquad ***$$

Introduco la quantità

$$\boxed{\tilde\varepsilon_k = \frac{1}{2} \left[\left(t_{kk} + t_{\tilde k\tilde k} - 2\lambda \right) + \sum_{k'} \left(\bar v_{kk'kk'} + \bar v_{\tilde k k'\tilde k k'} \right) v_{k'}^2 \right] \quad (2)}$$

Questa generalizza l'energia di HF. Infatti, se $t_{\tilde k\tilde k} = t_{kk}$ e $\bar v_{\tilde k k'\tilde k k'} = \bar v_{kk'kk'}$, si ha $\tilde\varepsilon_k = t_{kk} + \sum_{k'} \bar v_{kk'kk'} \cdot v_{k'}^2 - \lambda$

e l'energia HF è $\varepsilon_k = t_{kk} + \sum_{k'} \bar v_{kk'kk'}$.

Definisco poi

$$\Delta_k = -\sum_{k'>0} \bar v_{k\tilde k k'\tilde k'} u_{k'} v_{k'}$$

Allora si può scrivere dalla ***

$$0 = 2u_k v_k \tilde{\varepsilon}_k + \Delta_k (v_k^2 - u_k^2)$$

$$4\tilde{\varepsilon}_k^2 u_k^2 v_k^2 = \Delta_k^2 (u_k^2 - v_k^2)^2$$

Usando

$$1 = (u_k^2 + v_k^2)^2 = u_k^4 + v_k^4 + 2u_k^2 v_k^2 \Rightarrow u_k^4 + v_k^4 = 1 - 2u_k^2 v_k^2$$

e

$$(u_k^2 - v_k^2)^2 = u_k^4 + v_k^4 - 2u_k^2 v_k^2 = 1 - 4u_k^2 v_k^2$$

si trova

$$4\tilde{\varepsilon}_k^2 u_k^2 v_k^2 = \Delta_k^2 - \Delta_k^2 u_k^2 v_k^2$$

Introduciamo l'energia di quasi-particella

$$\boxed{E_k = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_k^2 + \Delta_k^2}} \qquad (3)$$

Allora

$$4v_k^2(1 - v_k^2)E_k^2 = \Delta_k^2$$

$$4v_k^4 E_k^2 - 4v_k^2 E_k^2 + \Delta_k^2 = 0$$

$$v_k^2 = \frac{2E_k^2 \pm \sqrt{4E_k^4 - 4E_k^2\Delta_k^2}}{4E_k^2} = \frac{1}{2} \pm \frac{|\tilde{\varepsilon}_k|}{2E_k}$$

Scegliamo come soluzione

$$\boxed{v_k^2 = \frac{1}{2} - \frac{\tilde{\varepsilon}_k}{2E_k}} \qquad (4)$$

ovvero il segno − sopra λ, dove $\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k - \lambda = |\tilde{\varepsilon}_k|$, e il segno + sotto λ, dove $\tilde{\varepsilon}_k = \varepsilon_k - \lambda = -|\tilde{\varepsilon}_k|$.

In questo modo, nel limite $\Delta_k \to 0$, si ottiene il corretto limite HF.

$$(5) \quad \boxed{u_k^2 = 1 - v_k^2 = \frac{1}{2} + \frac{\tilde{\varepsilon}_k}{2E_k}} \quad , \quad u_k v_k = \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{\tilde{\varepsilon}_k^2}{4E_k^2}}$$

Torniamo alla definizione di Δ_k data alla fine di p. 7 e sostituiamo quanto sopra per $u_{k'}, v_{k'}$

$$\Delta_k = -\sum_{k'>0} \bar{v}_{k\tilde{k}k'\tilde{k}'} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_{k'}^2 - \tilde{\varepsilon}_{k'}^2}{E_{k'}^2}}$$

$$\boxed{\Delta_k = -\sum_{k'>0} \frac{\Delta_{k'}}{2E_{k'}} \bar{v}_{k\tilde{k}k'\tilde{k}'}} \qquad (6)$$

Questa è la "gap" equation

Il sistema di equazioni (1-6) per $\tilde{\varepsilon}_k$, E_k, Δ_k, u_k, v_k e λ è chiuso

In molti nuclei l'equazione (6) converge alla soluzione "normale" in cui $\Delta_k = 0$ per via dei valori elevati di $|\varepsilon_k - \lambda|$.

Nei sistemi a shell aperte si trova $\Delta \sim \frac{12}{\sqrt{A}}$ attorno alla sup di Fermi

La presenza di $\Delta_k \neq 0$ spiega l'energia di legame più elevata dei nuclei pari-pari e il gap tra il fondamentale e l'eccitato dato che è necessario "rompere" le coppie (Δ è $\sim$ l'energia di legame della coppia di Cooper)