ابررسانای یک بعدی در مدل هابارد:

هامیلتونی هابارد را برای یک ابررسانا می نویسیم. جمله برهم کنشی از مفهوم " زوج های کوپر" ناشی می شود:

$$H = \sum_{k\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} - \frac{1}{N} \sum_{k,k'} U\, c_{k\uparrow}^{\dagger}\, c_{-k\downarrow}^{\dagger} c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \qquad (1)$$

جمله برهم کنشی بر اساس زوج های کوپر نوشته شده است؛ یعنی یک جفت الکترون با اسپین و تکانه های مخالف نابود و یک جفت الکترون با اسپین مخالف و تکانه های مخالف و متفاوت از قبل خلق می شوند.

علامت منفی جمله برهم کنشی ناشی از "جاذبه" بودن برهم کنش است.

جمله انرژی جنبشی قطری است.برای قطری سازی جمله برهم کنشی ابتدا از "نظریه میدان میانگین" استفاده می کنیم و سپس با تبدیلاتی فرمیونی،هامیلتونی را قطری می کنیم:

$$H = H_0 + V, V = -\frac{U}{N} \sum_{k,k'} c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{-k\downarrow}^{\dagger} c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$$

$c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$ را A و $c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{-k\downarrow}^{\dagger}$ را B می نامیم و با توجه به روش میدان میانگین که توضیح دادیم پتانسیل را بازنویسی می کنیم:

$$V_{MF} = -\frac{U}{N} \sum_{k,k'} \{ \langle c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{-k\downarrow}^{\dagger} \rangle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} + \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{-k\downarrow}^{\dagger} + \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \langle c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{-k\downarrow}^{\dagger} \rangle \} \qquad (2)$$

عبارت Δ_k را به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$\Delta_k = -\frac{U}{N} \sum_{k'} \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \qquad (3)$$

در نتیجه هامیلتونی به این شکل بازنویسی می شود:

$$V_{MF} = -\sum_k \Delta_k^* c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - \sum_k \Delta_k\, c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{-k\downarrow}^{\dagger} + const \qquad (4)$$

این هامیلتونی جملات فرمیونی $c^{\dagger}c$ ندارد. این بدان معناست که:

الف) این هامیلتونی، یک سیستم موثر غیر برهم کنشی را توصیف می کند.

ب) این هامیلتونی، تعداد الکترون‌ها را پایسته نگه نمی دارد.

برای متعامدسازی، عملگرهای فرمیونی جدیدی معرفی می کنیم که ترکیبی خطی از عملگرهای c و $c^\dagger$ هستند:

$$\begin{pmatrix}\gamma_{k\uparrow}\\ \gamma_{k\downarrow}^\dagger\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}u_k^* & -v_k\\ v_k^* & u_k\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_{k\uparrow}\\ c_{-k\downarrow}^\dagger\end{pmatrix}\Longrightarrow\ \gamma_{k\uparrow}=u_k^*c_{k\uparrow}-v_kc_{-k\downarrow}^\dagger,\quad \gamma_{k\downarrow}^\dagger=\ v_k^*c_{k\uparrow}+u_kc_{-k\downarrow}^\dagger \qquad (5)$$

این نگاشت تبدیل "بوگولیوبوف –والاتین" نامیده می شود.

چون γها عملگرهای فرمیونی هستند روابط جابه جایی فرمیونی بین آن ها برقرار است:

$$\begin{aligned}
&\gamma_{k\uparrow}^\dagger=\ u_kc_{k\uparrow}^\dagger-v_k^*c_{-k\downarrow}\\
&1=\{\gamma_{k\uparrow},\gamma_{k\uparrow}^\dagger\}=\gamma_{k\uparrow}\gamma_{k\uparrow}^\dagger+\gamma_{k\uparrow}^\dagger\gamma_{k\uparrow}\\
&\quad=(u_k^*c_{k\uparrow}-v_kc_{-k\downarrow}^\dagger)(u_kc_{k\uparrow}^\dagger-v_k^*c_{-k\downarrow})+(u_kc_{k\uparrow}^\dagger-v_k^*c_{-k\downarrow})(u_k^*c_{k\uparrow}-v_kc_{-k\downarrow}^\dagger)\\
&\quad=|u_k|^2c_{k\uparrow}c_{k\uparrow}^\dagger-u_k^*v_k^*c_{k\uparrow}c_{-k\downarrow}-v_ku_kc_{-k\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow}^\dagger+|v_k|^2c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k\downarrow}+|u_k|^2c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow}\\
&\qquad\qquad-u_kv_kc_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger-v_k^*u_k^*c_{-k\downarrow}c_{k\uparrow}+|v_k|^2c_{-k\downarrow}c_{-k\downarrow}^\dagger\\
&\quad=|u_k|^2\{c_{k\uparrow},c_{k\uparrow}^\dagger\}+|v_k|^2\{c_{-k\downarrow}^\dagger,c_{-k\downarrow}\}-u_k^*v_k^*\{c_{k\uparrow},c_{-k\downarrow}\}-u_kv_k\{c_{-k\downarrow}^\dagger,c_{k\uparrow}^\dagger\}\\
&=|u_k|^2+|v_k|^2=1 \qquad (6)
\end{aligned}$$

زیرا جابه جاگرهای اول و دوم برابر با یک و جابه جاگرهای سوم و چهارم صفر است.

با استفاده از این عبارت می توانیم وارون تبدیل فرمیونی بالا را بنویسیم:

$$\begin{pmatrix}c_{k\uparrow}\\ c_{-k\downarrow}^\dagger\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}u_k & v_k\\ -v_k^* & u_k^*\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\gamma_{k\uparrow}\\ \gamma_{-k\downarrow}^\dagger\end{pmatrix}\Longrightarrow c_{k\uparrow}=u_k\gamma_{k\uparrow}+v_k\gamma_{-k\downarrow}^\dagger \qquad ,c_{-k\downarrow}^\dagger=-v_k^*\gamma_{k\uparrow}+u_k^*\gamma_{-k\downarrow}^\dagger$$

$$\Longrightarrow c_{k\uparrow}^\dagger=u_k^*\gamma_{k\uparrow}^\dagger+v_k^*\gamma_{-k\downarrow}\quad ,c_{-k\downarrow}=-v_k\gamma_{k\uparrow}^\dagger+u_k\gamma_{-k\downarrow} \qquad (7)$$

با استفاده از روابط۴و۷، هامیلتونی ۱ را بازنویسی می کنیم:

$$\mathrm{H}=\sum_{\mathrm{k}\sigma}\xi_{\mathrm{k}}c_{\mathrm{k}\sigma}^\dagger c_{\mathrm{k}\sigma}-\sum_{\mathrm{k}}\Delta_{\mathrm{k}}^*c_{-\mathrm{k}\downarrow}c_{\mathrm{k}\uparrow}-\sum_{\mathrm{k}}\Delta_{\mathrm{k}}\,c_{\mathrm{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathrm{k}\downarrow}^\dagger+\mathrm{const}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_k \{\xi_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + \xi_k c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow} - \Delta_k^* c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - \Delta_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger + const\} \\
&= \sum_k \{\xi_k \left(u_k^* \gamma_{k\uparrow}^\dagger + v_k^* \gamma_{-k\downarrow}\right)\left(u_k \gamma_{k\uparrow} + v_k \gamma_{-k\downarrow}^\dagger\right) \\
&\qquad + \xi_k \left(-v_k^* \gamma_{k\uparrow} + u_k^* \gamma_{-k\downarrow}^\dagger\right)\left(-v_k \gamma_{k\uparrow}^\dagger + u_k \gamma_{-k\downarrow}\right) \\
&\qquad - \Delta_k^* \left(-v_k \gamma_{k\uparrow}^\dagger + u_k \gamma_{-k\downarrow}\right)\left(u_k \gamma_{k\uparrow} + v_k \gamma_{-k\downarrow}^\dagger\right) \\
&\qquad - \Delta_k \left(u_k^* \gamma_{k\uparrow}^\dagger + v_k^* \gamma_{-k\downarrow}\right)\left(-v_k^* \gamma_{k\uparrow} + u_k^* \gamma_{-k\downarrow}^\dagger\right) + const\} \\
&= \sum_k \{\xi_k \left(|u_k|^2 \gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{k\uparrow} + |v_k|^2 \gamma_{-k\downarrow} \gamma_{-k\downarrow}^\dagger + u_k^* v_k \gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{-k\downarrow}^\dagger + u_k v_k^* \gamma_{-k\downarrow} \gamma_{k\uparrow}\right) \\
&\qquad + \xi_k \left(|u_k|^2 \gamma_{-k\downarrow}^\dagger \gamma_{-k\downarrow} + |v_k|^2 \gamma_{k\uparrow} \gamma_{k\uparrow}^\dagger + - v_k^* u_k \gamma_{k\uparrow} \gamma_{-k\downarrow} - v_k u_k^* \gamma_{-k\downarrow}^\dagger \gamma_{k\uparrow}^\dagger\right) \\
&\qquad - \Delta_k^* \left({u_k}^2 \gamma_{-k\downarrow} \gamma_{k\uparrow} - v_k u_k \gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{k\uparrow} + u_k v_k \gamma_{-k\downarrow} \gamma_{k\downarrow}^\dagger - {v_k}^2 \gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{k\downarrow}^\dagger\right) \\
&\qquad - \Delta_k \left({u_k^*}^2 \gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{k\downarrow}^\dagger - u_k^* v_k^* \gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{k\uparrow} + v_k^* u_k^* \gamma_{-k\downarrow} \gamma_{k\downarrow}^\dagger - {v_k^*}^2 \gamma_{-k\downarrow} \gamma_{k\uparrow}\right) + const\} \\
&= \sum_k \{(\xi_k |u_k|^2 - \xi_k |v_k|^2 + \Delta_k^* v_k u_k + \Delta_k u_k^* v_k^*) \gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{k\uparrow} \\
&\qquad + (\xi_k |u_k|^2 - \xi_k |v_k|^2 + \Delta_k^* v_k u_k + \Delta_k u_k^* v_k^*) \gamma_{-k\downarrow}^\dagger \gamma_{-k\downarrow} \\
&\qquad + \left(2\xi_k u_k^* v_k + \Delta_k^* {v_k}^2 - \Delta_k {u_k^*}^2\right) \gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{-k\downarrow}^\dagger \\
&\qquad + \left(2\xi_k v_k^* u_k + \Delta_k^* {u_k}^2 - \Delta_k {v_k^*}^2\right) \gamma_{-k\downarrow} \gamma_{k\uparrow}\} + \ const \qquad (9)
\end{aligned}
$$

در نوشتن تساوی آخر از رابطه جابه جایی فرمیونی استفاده کردیم و مقادیر ثابت جدید را در عبارت const قرار دادیم.

اما برای جملات $\gamma^\dagger\gamma^\dagger$ و $\gamma\gamma$ که تعداد ذرات را پایسته نگه نمی دارند باید ضریب شان به ازای تمام kها صفر شود. از رابطه ۹ به دست می آید:

$$2\xi_k u_k^* v_k + \Delta_k^* {v_k}^2 - \Delta_k {u_k^*}^2 = 0 \qquad (10-1)$$

$$2\xi_k v_k^* u_k + \Delta_k^* {u_k}^2 - \Delta_k {v_k^*}^2 = 0 \qquad (10-2)$$

Δ_k ، u_k و v_k را به صورت نمایی می نویسیم و رابطه "۲-۱۰" قرار می دهیم.

$$\Delta_k = |\Delta_k| e^{i\phi_k}, \qquad u_k = |u_k| e^{i\alpha_k}, \qquad v_k = |v_k| e^{i\beta_k}$$

$$\Longrightarrow 2\xi_k|u_k|e^{-i\alpha_k}|v_k|e^{i\beta_k} + |\Delta_k|e^{-i\phi_k}|v_k|^2 e^{2i\beta_k} - |\Delta_k|e^{i\phi_k}|u_k|^2 e^{-2i\alpha_k} = 0$$

$$\Longrightarrow 2\xi_k|u_k||v_k|e^{i(\beta_k-\alpha_k)} + |\Delta_k|(|v_k|^2 e^{i(2\beta_k-\phi_k)} - |u_k|^2 e^{i(\phi_k-2\alpha_k)} = 0 \qquad (11)$$

مقادیر α_k،β_k و ϕ_k فازهای قراردادی هستند.α_k را صفر و ϕ_k وβ_k را مساوی در نظر می گیریم، این کار خللی در حل مساله وارد نمی کند.

$$\alpha_k = 0\,, \phi_k = \beta_k \implies 2\xi_k|u_k||v_k| + |\Delta_k|(|v_k|^2 - |u_k|^2) = 0$$

$$\Longrightarrow 4\left({\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2\right)|u_k|^2|v_k|^2 = |\Delta_k|^2(|v_k|^4 + |u_k|^4 + 2|u_k|^2|v_k|^2)$$

$$= |\Delta_k|^2(|v_k|^2 + |u_k|^2)^2 = |\Delta_k|^2$$

$$|u_k||v_k| = \frac{|\Delta_k|}{2\sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2}} \Longrightarrow \qquad u_k v_k = \frac{\Delta_k}{2\sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2}} \qquad (12)$$

با استفاده از رابطه ۱۱ می توان به دست آورد:

$$|u_k|^2 - |v_k|^2 = \frac{\xi_k}{\sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2}} \qquad (13)$$

با استفاده از دستگاه دو معادله دو مجهول ۶ و ۱۳ می توان $|u_k|^2$ و $|v_k|^2$ را به دست آورد:

$$|u_k|^2 = \frac{1}{2}\left\{1 + \frac{\xi_k}{\sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2}}\right\} \text{ و } |v_k|^2 = \frac{1}{2}\left\{1 - \frac{\xi_k}{\sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2}}\right\} \qquad (14)$$

از رابطه ۹ و با استفاده از این که ضرایب $\gamma^\dagger\gamma^\dagger$ و $\gamma\gamma$ صفر هستند و با بهره گیری از مقادیر به دست آمده برای $|v_k|^2$و$|u_k|^2$ در رابطه ۱۴ هامیلتونی را بازنویسی می کنیم:

$$H_{Bcs} = \sum_k \left\{(\xi_k|u_k|^2 - \xi_k|v_k|^2 + \Delta_k^* v_k u_k + \Delta_k u_k^* v_k^*)\gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{k\uparrow}\right.$$

$$\left. + (\xi_k|u_k|^2 - \xi_k|v_k|^2 + \Delta_k^* v_k u_k + \Delta_k u_k^* v_k^*)\gamma_{-k\downarrow}^\dagger \gamma_{-k\downarrow}\right\}$$

$$= \sum_k \left(\frac{\xi_k}{2} \left\{ 1 + \frac{\xi_k}{\sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2}} \right\} - \frac{\xi_k}{2} \left\{ 1 - \frac{\xi_k}{\sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2}} \right\} + \Delta_k^* \left\{ \frac{\Delta_k}{\sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2}} \right\} \right.$$

$$\left. + \Delta_k \left\{ \frac{\Delta_k^*}{\sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2}} \right\} \ (\gamma^\dagger_{k\uparrow}\gamma_{k\uparrow} + \gamma^\dagger_{-k\downarrow}\gamma_{-k\downarrow}) \right)$$

$$= \sum_k \left(\frac{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2}{\sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2}} \right) (\gamma^\dagger_{k\uparrow}\gamma_{k\uparrow} + \gamma^\dagger_{-k\downarrow}\gamma_{-k\downarrow})$$

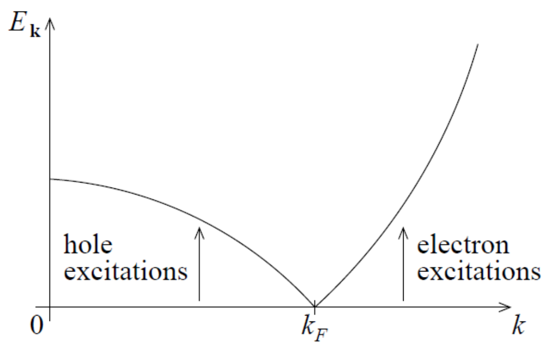
$$= \sum_k \sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2} \, (\gamma^\dagger_{k\uparrow}\gamma_{k\uparrow} + \gamma^\dagger_{-k\downarrow}\gamma_{-k\downarrow}) \qquad (15)$$

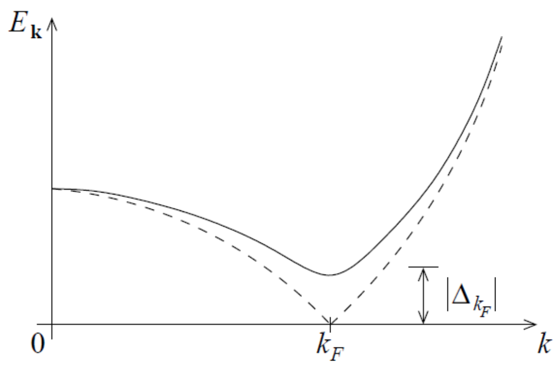
از $\xi_k = \xi_{-k}$ و فرض منطقی $|\Delta_k| = |\Delta_{-k}|$ استفاده می کنیم و رابطه ۱۵ را بازنویسی می‌کنیم:

$$= \sum_k E_k \, \gamma^\dagger_{k\sigma}\gamma_{k\sigma} \,, \quad E_k = \sqrt{{\xi_k}^2 + |\Delta_k|^2} \qquad (16)$$

رابطه ۱۶ یک رابطه قطری است بر حسب عملگرهای فرمیونی $\gamma_{k\sigma}$و$\gamma^\dagger_{k\sigma}$ و انرژی E_k که مقدار آن به $|\Delta_k|$ وابسته است. پس اگر معنای فیزیکی سه کمیت $\gamma_{k\sigma}$،$\gamma^\dagger_{k\sigma}$وΔ_k را معلوم کنیم،می توانیم از این هامیلتونی در محاسبات مان استفاده کنیم.

از رابطه ۱۶ می توان Δ_k را به صورت یک "گاف انرژی" تعبیر کرد. در واقع Δ_k تغییری به مانند زیر در نمودار پاشندگی ایجاد می کند:





این گاف انرژی ناشی از جمله انرژی پتانسیل V بود که بر اساس زوج های کوپر نوشته بودیم.

اما برای توصیف ویژگی های عملگرهای γ و $\gamma^\dagger$ مقادیر $|v_k|^2$ و $|u_k|^2$ را از رابطه ۱۴ در زمانی که برهم کنش نداریم بازنویسی می کنیم:

$$|u_k|^2 = \frac{1}{2}\left(1+\frac{\xi_k}{|\xi_k|}\right) = \begin{cases} 1 & \xi_k > 0 \\ 0 & \xi_k < 0 \end{cases}$$

$$|v_k|^2 = \frac{1}{2}\left(1-\frac{\xi_k}{|\xi_k|}\right) = \begin{cases} 0 & \xi_k > 0 \\ 1 & \xi_k < 0 \end{cases}$$

با توجه به رابطه ۵:

$$\begin{pmatrix} \gamma_{k\uparrow} \\ \gamma_{k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k^* & -v_k \\ v_k^* & u_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{cases} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} & \xi_k > 0 \\ \begin{pmatrix} -c_{-k\downarrow}^\dagger \\ c_{k\uparrow} \end{pmatrix} & \xi_k < 0 \end{cases}$$

یعنی عملگرهای γ و $\gamma^\dagger$ برای $\xi_k > 0$ همان عملگرهای الکترونی اند؛ اما برای $\xi_k < 0$ توصیف کننده یک حفره اند.

با توجه به $\xi_k = \epsilon_k - \mu$ که ناشی از عبارت تابع توزیع فرمی است[۸] و برابری μ و ϵ_F در دمای صفر می توان عبارت بالا را به این صورت بیان کرد که شبه ذرات بوگولیوبوف ترکیب خطی از ذرات و حفره ها هستند که در پایین انرژی فرمی بیشتر شبیه حفره ها و در بالای انرژی فرمی بیشتر شبیه الکترون ها رفتار می کنند. اما در انرژی فرمی:

$$\begin{pmatrix} \gamma_{k\uparrow} \\ \gamma_{k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} e^{i\phi_k} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} e^{-i\phi_k} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{cases} \gamma_{k\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}} c_{k\uparrow} - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi_k} c_{-k\downarrow}^\dagger & (17-1) \\ \gamma_{k\downarrow}^\dagger = \frac{-1}{\sqrt{2}} e^{-i\phi_k} c_{k\uparrow} + \frac{1}{\sqrt{2}} c_{-k\downarrow}^\dagger & (17-2) \end{cases}$$

روابط۱۷ نشان می دهند در دمای فرمی شبه ذرات از نظر الکتریکی خنثی هستند.[۹]