

## CHAPITRE XI

### Éléments de théorie BCS

#### 1 Fonction d'onde BCS

##### 1-1 Rappel sur la paire de Cooper isolée

Les électrons situés sur les états  $\mathbf{k}$ , états propres de l'opérateur quantité de mouvement, interagissent entre eux via un potentiel d'interaction attractif.

Les éléments de matrice du potentiel d'interaction entre électrons qui dans la base des  $\mathbf{k}$  sont du type  $\langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | V | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4 \rangle$ , ne sont significatifs que si:

i) L'état initial et l'état final sont des états de paire, c'est-à-dire:

$$\mathbf{k}_3 = -\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}' \text{ et } \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$$

ii) Les énergies  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  et  $\epsilon_{\mathbf{k}'}$  de l'état normal correspondant à ces vecteurs  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}'$  sont proches de l'énergie de Fermi et sont comprises dans une fenêtre  $[\epsilon_F, \epsilon_F + \hbar \omega_D]$ , soit en vecteur d'onde  $[k_F, k_C]$

Nous avons vu alors, qu'un couple d'électrons situés initialement au niveau de Fermi du métal normal acquerrait une énergie plus basse s'il se détachait de  $k_F$  et balayait les états de paire  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$  de la tranche  $[k_F, k_C]$ . Leur énergie se trouve abaissée de  $2\epsilon_F - \Delta$ . La fonction d'onde à 2 particules devient une combinaison linéaire cohérente des états de paire  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$  qu'il balaye

$$|\psi\rangle = \sum c_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$$

$|c_{\mathbf{k}}|^2$  est la probabilité pour trouver la paire dans l'état  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$  et,  $1 - |c_{\mathbf{k}}|^2$  la probabilité de ne pas l'y trouver.

##### 1-2 D'une paire à un ensemble de paires.

Les deux électrons qui se sont détachés du niveau de Fermi pour balayer les états de paires supérieurs ayant vu leur énergie abaissée, tout incite une seconde puis une troisième paire etc. à faire de même, ce qui conduirait à un abaissement progressif de l'énergie totale du système.

C'est ce qui se passe, mais ne peut se produire indéfiniment car les paires détachées doivent balayer simultanément les états de paires alloués (sans ce balayage

l'énergie n'est pas abaissée) et vont finir par "se gêner". Pour ne pas se gêner, elles pourraient explorer un plus grand nombre états d'énergies mais il faudrait aller chercher des états d'énergies plus élevées et il y aurait un coût trop important en énergie cinétique.

On arrivera à une situation optimale où un certain nombre d'électrons situés au voisinage du niveau de Fermi vont s'apparier et balayer les états vides situés au voisinage du niveau de Fermi et qui sont:

- au-dessus du niveau de Fermi, les états initialement vides desquels il faut retrancher "à tout moment" ceux qui sont occupés par d'autres paires (en cours de balayage)
- en dessous du niveau de Fermi, les états libérés par des paires qui sont allées explorer des états situés au-dessus du niveau de Fermi.

Dans ce contexte, on ne peut plus dire que telle ou telle paire a gagné une certaine quantité d'énergie, mais que le nouvel état a permis à l'ensemble du système de voir son énergie abaissée.

#### 1-3 Développement de la théorie BCS

Une description propre de ce nouvel état est complexe car il englobe un grand nombre de paires, qui plus est, en nombre non connu puisque ce sont des paires qui s'évaporent de la mer de Fermi sous-jacente avec laquelle elles forment néanmoins une continuité. La théorie BCS requiert la mise en oeuvre de techniques à N corps et de la seconde quantification que l'on trouve dans les articles spécialisés et c'est pourquoi le maître d'oeuvre, S. Bardeen, était allé chercher Leon Cooper "jeune et brillant théoricien apte à manier les techniques de la théorie quantique des champs" [MAT-P.240]. Leon Cooper eut d'ailleurs "la bonne idée", en essayant de décrire la fonction d'onde de toutes les paires à l'aide d'une expression analogue à celle qu'il avait rencontrée dans un article de Sin-Itiro Tomonaga consacré au nuage de probabilité de présence d'un pion (paire quark-antiquark) autour d'un nucléon statique.

Le développement de cette théorie passe par plusieurs niveaux de concepts et d'approximations:

- Le concept premier est que l'état supraconducteur ne peut être obtenu par une simple théorie de perturbation. Il faut rediagonaliser complètement la matrice hamiltonienne (souvenez-vous de l'exemple fondamental).
- C'est un problème à N corps. On ne peut pas calculer des niveaux d'énergie puis les peupler. Si on veut conserver cette notion, il faut admettre que la position de chaque niveau dépend du peuplement des autres.
- Il faut trouver une interaction attractive. L'interaction électron-phonon fait l'affaire et elle est suggérée par l'effet isotopique ( $T_c$  dépend de l'isotope du supraconducteur, de la

masse de ses atomes et donc de leur fréquence de vibration). D'autres types d'interactions peuvent aussi convenir.

- Il faut savoir retenir la partie essentielle de l'hamiltonien et c'est ce que BCS ont fait avec une fonction d'onde d'essais particulièrement bien sentie.

- Enfin, il est utile de faire de bonnes approximations pour rendre le calcul faisable et le résultat interprétable.

#### I-4 Raccourci de la fonction d'onde de l'état BCS

Les états de paires  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$ , états propres de l'opérateur quantité de mouvement, forment une base de tout état de paire. On pourrait alors penser que l'état du système est parfaitement décrit par l'amplitude de probabilité d'occupation de chaque état de paire  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$  et la dynamique de retour à l'équilibre après perturbation.

L'information minimale serait l'amplitude de probabilité  $v_{\mathbf{k}}$  qu'un état de paire soit occupé ou libre.  $|v_{\mathbf{k}}|^2$  est la probabilité qu'un état de paire soit occupé et  $|u_{\mathbf{k}}|^2 = 1 - |v_{\mathbf{k}}|^2$  la probabilité qu'il soit non occupé.

En fait, il est insuffisant de connaître la suite des  $v_{\mathbf{k}}$  en amplitude et en phase. Il faut aussi connaître la suite des  $u_{\mathbf{k}}$  (ce qui revient à  $u_{\mathbf{k}}$  non seulement en amplitude que l'on a déjà à partir des  $v_{\mathbf{k}}$ , mais aussi en phase.

La description de l'état  $|\Phi\rangle$  du système dans sa globalité est donnée par la suite des couples  $(u_{\mathbf{k}}^*, v_{\mathbf{k}})$ :

$$|\Phi\rangle = \{ (u_{\mathbf{k}1}^*, v_{\mathbf{k}1}), (u_{\mathbf{k}2}^*, v_{\mathbf{k}2}), (u_{\mathbf{k}}^*, v_{\mathbf{k}}), (u_{\mathbf{k}'}^*, v_{\mathbf{k}'}) \dots \}$$

sachant que chaque couple  $(u_{\mathbf{k}}^*, v_{\mathbf{k}})$  obéit à :  $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$

#### I-5 Dans le langage de la seconde quantification

Juste pour "humer" le parfum de cette technique et faire le lien avec des ouvrages spécialisés, la fonction d'onde BCS s'écrit:

$$|\Phi\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+) |0\rangle$$

et se lit ainsi:

$|0\rangle$  est la fonction d'onde du vide: pas de paires en train de balayer, juste la mer de Fermi sous-jacente.

$a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+$  est l'opérateur qui met un électron dans l'état  $-\mathbf{k}\uparrow$  ( $-\mathbf{k}$ , spin vers le haut)

$a_{\mathbf{k}\uparrow}^+$  est l'opérateur qui met un électron dans l'état  $-\mathbf{k}\downarrow$  ( $\mathbf{k}$ , spin vers le haut)

L'état  $a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ |0\rangle$  est un état où  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$  est occupé (on oublie les spins)

$v_{\mathbf{k}}$  est l'amplitude de probabilité que cette double occupation se réalise.

$u_{\mathbf{k}}$  est l'amplitude de probabilité que cette double occupation ne se réalise pas.

$(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+) |0\rangle = u_{\mathbf{k}} |0\rangle + v_{\mathbf{k}} [a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ |0\rangle]$  est une superposition cohérente de l'état  $|0\rangle$  (sans occupation des états  $\mathbf{k}$ ) et de l'état  $[a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ |0\rangle]$  (avec occupation des  $\mathbf{k}$ ).  $u_{\mathbf{k}}$  et  $v_{\mathbf{k}}$  sont les amplitudes de probabilité de réalisation de ces deux états.

Ce que l'on a fait sur un  $\mathbf{k}$ , on le fait successivement sur tous les autres, et c'est cela qui amène la factorisation. Les paires sont traitées comme indépendantes.

#### I-6 Etat normal

Dans l'état normal, tous les états situés sous le niveau de Fermi et les états situés au-dessus sont vides:

Etat normal:

$$u_{\mathbf{k}} = 0 \quad v_{\mathbf{k}} = 1 \quad \text{si } |\mathbf{k}| < k_f$$

$$u_{\mathbf{k}} = 1 \quad v_{\mathbf{k}} = 0 \quad \text{si } |\mathbf{k}| > k_f$$

## II Contributions énergétiques de BCS

### II-1 Energie cinétique

Une paire située sur l'état  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$  possède une énergie cinétique  $2 \varepsilon_{\mathbf{k}}$ . Chaque état de paire apporte une énergie cinétique proportionnelle à sa probabilité d'occupation. On a donc:

$$E_{c0} = \sum_{\mathbf{k}} 2 |v_{\mathbf{k}}|^2 \zeta_{\mathbf{k}}$$

où le zéro des énergies est situé à  $\varepsilon_F$ :  $\zeta_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_F$

### II-2 Rappel de l'expression de l'énergie potentielle dans un état $|\psi\rangle$ :

Le calcul de l'énergie potentielle est moins trivial et nous allons travailler par analogie.

Prenons l'exemple d'un système quantique habituel d'une particule dont l'opérateur hamiltonien  $\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}_0 + \hat{\mathbf{V}}$ , soit  $|i\rangle$  et  $\varepsilon_i$  respectivement les états propres et les valeurs propres de l'opérateur  $\hat{\mathbf{H}}_0$  non perturbé (ici énergie cinétique).

Dans l'état  $|\psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$ , l'énergie moyenne qui est celle que l'on obtiendrait en moyennant les résultats de mesures effectuées sur un grand nombre de systèmes identiques, est:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{i,j} c_j^* c_i \langle j | \hat{H} | i \rangle$$

$\hat{H}_0$  étant diagonal, l'énergie cinétique moyenne est:

$$E_c = \langle \psi | \hat{H}_0 | \psi \rangle = \sum_i |c_i|^2 \epsilon_i$$

et l'énergie potentielle moyenne est:

$$\langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle = \sum_{i,j} c_j^* c_i \langle j | \hat{V} | i \rangle = \sum_{i,j} c_j^* c_i V_{ij}$$

que l'on énoncera ainsi:

L'énergie potentielle moyenne est égale à la somme des produits de trois termes

$$\left( \begin{array}{l} \text{Amplitude de probabilité} \\ \text{de trouver le système} \\ \text{dans l'état final } |j\rangle \end{array} \right)^* \times \left( \begin{array}{l} \text{Elément de matrice } V_{ij} \\ \text{entre l'état initial } |i\rangle \\ \text{et l'état final } |j\rangle \end{array} \right) \times \left( \begin{array}{l} \text{Amplitude de probabilité} \\ \text{de trouver le système} \\ \text{dans l'état initial } |i\rangle \end{array} \right)$$

C'est cette formulation que les techniques de mécanique quantique à N corps généralisent et dont nous essaierons de nous convaincre.

II-3 Energie potentielle dans l'état BCS (valeur moyenne de l'hamiltonien BCS)

L'état BCS étant un état à grand nombre de particules, l'énergie moyenne du système est aux fluctuations près celle trouvée lors d'une mesure. Les éléments de matrice sont bien identifiés; ce sont les  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ .

Il faut maintenant, pour calculer l'énergie potentielle, multiplier chaque élément de matrice  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$  par l'amplitude de probabilité de trouver le système dans l'état initial et par celle de trouver le système dans l'état final.

Il faut avant tout bien identifier ce que sont les états initiaux et finaux d'une transition d'une paire de l'état  $|\mathbf{k}', -\mathbf{k}'\rangle$  vers l'état  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$ . Ce sont:

Etat initial:

L'état de paire  $|\mathbf{k}', -\mathbf{k}'\rangle$  est occupé et l'état de paire  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$  est vide.

L'amplitude de probabilité de trouver dans l'état  $|\Phi\rangle$  l'état initial  $\{ |\mathbf{k}', -\mathbf{k}'\rangle > \text{occupé et } |\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle > \text{vide} \}$  est  $v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'}$

Etat final

L'état de paire  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$  est occupé et l'état de paire  $|\mathbf{k}', -\mathbf{k}'\rangle$  est vide.

L'amplitude de probabilité de trouver dans l'état  $|\Phi\rangle$  l'état initial  $\{ |\mathbf{k}', -\mathbf{k}'\rangle > \text{vide et } |\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle > \text{occupé} \}$  est  $v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'}$ .

L'énergie potentielle est donc:

$$E_p = \langle \Phi | \hat{V} | \Phi \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}$$

C'est exactement à cette relation que conduit le calcul BCS complet. Nous avons pris un petit raccourci pour y arriver; maintenant nous continuons avec BCS comme les grands.

II-4 Effets à N corps

Si le terme d'énergie cinétique ne présente aucune difficulté puisque l'on ajoute simplement les énergies cinétiques de chaque particule, le terme d'énergie potentielle paraît plus complexe car un effet à N-corps se manifeste. Très prosaïquement, on pourrait dire que c'est un effet de "gêne entre particules" et si on reprendait les §IV-4 et IX-4 sur l'exemple fondamental, on ajouterait une troisième effet entre lesquels l'équilibre doit être réalisé, avec trois propositions que on peut résumer ainsi:

- i) Un maximum de paires qui balayent un maximum d'états conduit à un abaissement de l'énergie.
- ii) Trop de paires simultanément sur les états de balayage se gênent et bloquent le mouvement de balayage nécessaire à l'abaissement de l'énergie.
- iii) L'exploration des états très énergétiques a un coût.

C'est ce que traduit l'énergie BCS où i) et ii) sont les règles qui dictent la forme de l'énergie potentielle et iii) celle de l'énergie cinétique.

II-5 Recherche de l'état BCS fondamental: solution générale

L'énergie totale s'écrit donc:

$$E_{BG} = E_c + E_p = \sum_{\mathbf{k}} 2 |v_{\mathbf{k}}|^2 \zeta_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}$$

où la sommation sur les  $\mathbf{k}$  se réduit à l'intervalle  $k_F \pm k_c$  où :  $k_c = \sqrt{\frac{2m\phi_D}{\hbar}}$

L'expression de l'énergie fait apparaître 4 séries de variables: les amplitudes des  $u_{\mathbf{k}}$  et  $v_{\mathbf{k}}$  et leurs phases qu'il faut ramener à trois variables indépendantes en raison de la relation  $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ .

Le problème est maintenant de chercher la distribution des variables indépendantes (3 par vecteur  $\mathbf{k}$ ) qui minimise l'énergie totale du système.

### III- Résolution de l'équation BCS à température nulle

#### III-1 Changement de variables

La méthode de résolution se trouve dans tous les livres spécialisés (voir par exemple [TIL-p.124] ou [TIN-p.26] et est identique à quelques variantes près.

Elle consiste à effectuer un changement de variables et à poser:

$$v_k = \exp i \varphi_k \sin \frac{\theta_k}{2}$$

$$u_k^* = \exp i (\varphi_k + \delta\varphi_k) \cos \frac{\theta_k}{2}$$

où les trois nouvelles variables indépendantes sont:

$\varphi_k$ , phases des  $v_k$ , qui situe les phases relatives de  $v_k$  par rapport aux  $v_{k'}$ .

$\delta\varphi_k$ , phases des  $u_k$ , qui situe les  $u_k$  par rapport aux  $v_k$ .

$\theta_k$ , angle imaginaire qui donne les amplitudes de  $u_k$  et  $v_k$  et assure  $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$

On pose aussi:

$$\Delta_k = \sum_{k'} V_{k'k} u_{k'} v_{k'}$$

#### III-2 Solution de l'équation BCS

La minimisation de l'énergie totale par rapport à ces trois nouvelles séries de variables conduit à un ensemble d'équations autocohérentes et à [TIL-p.124]:

$$\zeta_k \sin \theta_k + |\Delta_k| \cos \theta_k = 0$$

équation qui a 2 solutions:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sin \theta_k = -\frac{|\Delta_k|}{E_k} \\ \cos \theta_k = +\frac{\zeta_k}{E_k} \end{array} \right. \text{ ou } \left\{ \begin{array}{l} \sin \theta_k = +\frac{|\Delta_k|}{E_k} \\ \cos \theta_k = -\frac{\zeta_k}{E_k} \end{array} \right. \text{ avec } E_k^2 = |\Delta_k|^2 + \zeta_k^2$$

la première solution correspondant à un minimum d'énergie alors que la seconde est celle d'un maximum (TIL-p.125).

On peut vérifier sans trop de difficultés que l'on a l'ensemble de ces relations:

$$\sin \theta_k = -\frac{|\Delta_k|}{E_k} \quad \cos \theta_k = \frac{\zeta_k}{E_k}$$

$$|u_k|^2 - |v_k|^2 = \frac{\zeta_k}{E_k} \quad |u_k|^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\zeta_k}{E_k} \right) \quad |v_k|^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\zeta_k}{E_k} \right)$$

$$\Delta_k = |\Delta_k| \exp -i \delta\varphi_k \quad \Delta_k = - \sum_{k'} V_{k'k} \frac{\Delta_{k'}}{2 E_{k'}}$$

En remplaçant ces valeurs de  $u_k$  et  $v_k$  dans l'expression de  $E_{BG}$  du début de ce paragraphe, on obtient:

$$E_{BG} = \sum_{-k_c}^{+k_c} \left( 2 \zeta_k |v_k|^2 + \Delta_k^* u_k v_k \right) = \sum_{-k_c}^{+k_c} \left( 2 \zeta_k \sin^2 \frac{\theta_k}{2} + |\Delta_k| \sin \frac{\theta_k}{2} \cos \frac{\theta_k}{2} \right)$$

$$= \sum_{-k_c}^{+k_c} \left( \zeta_k (1 - \cos \theta_k) + \frac{1}{2} |\Delta_k| \sin \theta_k \right) = \sum_{-k_c}^{+k_c} \left( \zeta_k - \frac{\eta_k^2}{E_k} - \frac{|\Delta_k|^2}{2 E_k} \right)$$

L'énergie dans l'état normal de tranche des états  $k$  considérés, où tous les états sont occupés jusqu'à  $k_f$ , est:

$$E_N = \sum_{-k_c}^0 2 \zeta_k = \sum_{-k_c}^{k_c} \zeta_k$$

ce qui conduit à l'énergie de condensation:

$$E_{BG} - E_N = - \sum_{-k_c}^{+k_c} \left( \frac{\eta_k^2}{E_k} + \frac{|\Delta_k|^2}{2 E_k} \right)$$

$$= \sum_{-k_c}^{+k_c} \left( - \zeta_k \cos \theta_k + \frac{1}{2} |\Delta_k| \sin \theta_k \right)$$

La dernière expression met bien en évidence les contributions à l'énergie cinétique et à l'énergie potentielle.

#### III-3 Approximation de potentiel

Pour aller plus loin, il faut connaître les éléments de matrice  $V_{kk'}$ . L'approximation utilisée par BCS est celle que nous avons présentée et justifiée au chapitre précédent (II peut bien sûr y en avoir d'autres):

$$V_{k'k} = -V \quad \left\{ \begin{array}{l} |\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}| < \hbar \omega_D \\ |\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}| < \hbar \omega_D \end{array} \right. \text{ et } \quad \left\{ \begin{array}{l} k_F - k_c < k < k_F + k_c \\ \text{avec } k_c = \sqrt{\frac{2m\omega_D}{\hbar}} \end{array} \right.$$

$$V_{k'k} = 0 \quad \text{autrement}$$

La première conséquence est que:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = V \sum_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}$$

devient une somme sur les  $\mathbf{k}'$  qui ne dépend pas de  $\mathbf{k}$ , ce qui signifie que  $\Delta_{\mathbf{k}}$  est une constante  $\Delta$ . Les relations du paragraphe précédent deviennent:

$$E_{\mathbf{k}}^2 = |\Delta_{\mathbf{k}}|^2 + \zeta_{\mathbf{k}}^2 \implies E_{\mathbf{k}}^2 = \Delta^2 + \zeta_{\mathbf{k}}^2$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k} \mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2 E_{\mathbf{k}'}} \implies 1 = V \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2 \sqrt{\Delta^2 + \zeta_{\mathbf{k}}^2}}$$

$$E_{\text{BG}} = \sum_{\mathbf{k}} \left( \zeta_{\mathbf{k}} - \frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{2 E_{\mathbf{k}}} \right) \implies E_{\text{BG}} = \sum_{\mathbf{k}} \left( \zeta_{\mathbf{k}} - \frac{\zeta_{\mathbf{k}}^2}{\sqrt{\Delta^2 + \zeta_{\mathbf{k}}^2}} \frac{\Delta^2}{2 \sqrt{\Delta^2 + \zeta_{\mathbf{k}}^2}} \right)$$

### III-4 Calcul de l'énergie fondamentale dans un modèle de gaz d'électrons libres

Dans la distribution des états  $\mathbf{k}$  et la relation de dispersion, celle des électrons libres des modèles élémentaires, on peut passer maintenant des sommes aux intégrales par la substitution:

$$\sum_{\mathbf{k}} \longrightarrow \int_{-\hbar \omega_D}^{+\hbar \omega_D} g(\epsilon_F) d\epsilon$$

ce qui conduit à une première transformation:

$$1 = V \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2 \sqrt{\Delta^2 + \zeta_{\mathbf{k}}^2}} \implies 1 = g(\epsilon_F) V \int_{-\hbar \omega_D}^{+\hbar \omega_D} \frac{1}{\zeta^2 + \Delta^2} d\zeta$$

qui entraîne:

$$|\Delta| = \frac{\hbar \omega_D}{\text{sh} \frac{1}{g(\epsilon_F) V}}$$

qui, dans la limite  $g(\epsilon_F) V < 1$ , s'approxime en:

$$|\Delta| = 2 \hbar \omega_D \exp(-1/g(\epsilon_F) V)$$

puis à une seconde transformation:

$$E_{\text{BG}} = \sum_{\mathbf{k}} \left( \zeta_{\mathbf{k}} - \frac{\zeta_{\mathbf{k}}^2}{\sqrt{\Delta^2 + \zeta_{\mathbf{k}}^2}} \frac{\Delta^2}{2 \sqrt{\Delta^2 + \zeta_{\mathbf{k}}^2}} \right) = g(\epsilon_F) \int_{-\hbar \omega_D}^{+\hbar \omega_D} \left\{ \zeta + \frac{\zeta^2}{\sqrt{\zeta^2 + \Delta^2}} - \frac{\Delta^2}{2 \sqrt{\zeta^2 + \Delta^2}} \right\} d\zeta$$

En tenant compte du fait que l'énergie de l'état normal est:

$$E_N = -2 \int_{-\hbar \omega_D}^0 g(\epsilon_F) \zeta d\zeta$$

La différence d'énergie entre l'état fondamental BCS et l'état normal est:

$$E_{\text{BG}} - E_N = -2 \int_0^{+\hbar \omega_D} g(\epsilon_F) \left\{ \frac{\zeta^2}{\sqrt{\zeta^2 + \Delta^2}} + \frac{\Delta^2}{2 \sqrt{\zeta^2 + \Delta^2}} \right\} d\zeta$$

soit:

$$E_{\text{BG}} - E_N = \frac{2 g(\epsilon_F) (\hbar \omega_D)^2}{\exp\left(\frac{2}{g(\epsilon_F) V}\right) - 1}$$

qui, en couplage faible  $g(\epsilon_F) V < 1$ , s'approxime en:

$$E_{\text{BG}} - E_N = -2 g(\epsilon_F) (\hbar \omega_D)^2 \exp\left(\frac{-2}{g(\epsilon_F) V}\right)$$

Ce résultat est celui avancé au chapitre précédent par des arguments qualitatifs.

### III-5 Amplitude de condensation et longueur de corrélation

Les états  $\mathbf{k}$  situés au voisinage de  $k_F$  et concernés par le balayage sont ceux dont le produit  $u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}$  est significatif. Ce produit est appelé amplitude de condensation (GEN-p.114).

L'état fondamental étant construit comme une combinaison linéaire de ces états, leur étalement  $\Delta k$  est relié à la distance moyenne  $\Delta x = \xi$  entre électrons d'une même paire par la relation d'incertitude:

$$\Delta x \Delta k = 1$$

C'est un point que nous avons détaillé au chapitre précédent et qui est confirmé.

les profils de  $|u_{\mathbf{k}}|$ ,  $|v_{\mathbf{k}}|$  et  $F_{\mathbf{k}} = |u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}|$

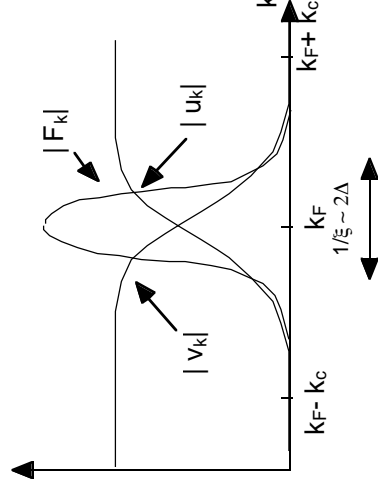


Figure 1:

Profil des amplitudes de probabilité d'occupation  $v_{\mathbf{k}}$  et de non-occupation  $u_{\mathbf{k}}$  des états de paire.

$F_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}$  est l'amplitude de condensation

## IV Excitations à 0K

### IV-1 Types d'excitations

La première excitation que l'on peut imaginer, serait celle qui correspond à une solution de la suite  $\{u_k, v_k\}$  (voir § II-3 et II-4) qui ne serait pas celle fournissant la plus basse énergie au système. On garde bien les paires mais elles se décrivent avec une combinaison linéaire d'états  $|k, -k\rangle$  moins bien optimisée. On "place des paires sur des états excités" comme on change un électron de niveau d'énergie. Nous reviendrons plus loin sur ce type d'excitations.

Le deuxième type d'excitation serait de briser une paire et de placer les électrons célibataires sur des états  $k$  et  $k'$  distincts. On dit que ces électrons deviennent des quasi-particules et c'est par l'étude de l'énergie d'une quasi-particule que nous allons commencer.

### IV-2 Quasi-particules

On se pose la question du devenir de l'énergie du système si on place un "électron célibataire" sur l'état  $k$ . "Electron célibataire" sur l'état  $k$  veut dire aussi "une absence d'électron ou un trou sur l'état  $-k$ ". Une quasi-particule est une paire électron-trou sur l'état de paire  $|k, -k\rangle$ . Elle retire cet état de ceux accessibles par les paires de Cooper.

Effectuons un bilan énergétique de la création d'une quasi-particule et analysons les trois termes qui y participent:

Mécanisme	Contribution énergétique
i) Retraitement de l'énergie cinétique de l'état de paire qui était occupé avec la probabilité $v_k^2$ :	$- 2 \zeta_k v_k^2$
ii) Energie cinétique de l'électron placé sur l'état $k$	$+ \zeta_k$
iii) Modification de l'énergie potentielle: $E_p = V \sum_{\substack{k, k'}} v_k^* u_k^* u_k v_{k'}$ un $k$ étant extrait des états de paire, l'énergie potentielle est augmentée de: $2V \left( \sum_{k'} u_k^* v_{k'}^* \right) v_k u_k = 2 \Delta u_k v_k$ le facteur 2 provenant de la double somme dans $E_p$ .	$+ 2 \Delta u_k v_k$

Le coût énergétique est donc (cela se vérifie facilement):

$$\zeta_k - 2 \zeta_k v_k^2 + 2 \Delta u_k v_k = E_k$$

Ainsi,  $E_k$  est l'énergie d'excitation du système si on place un électron en  $+k$  avec absence d'électron en  $-k$ , ou si on place un électron en  $-k$  avec absence d'électron en  $+k$ .

### IV-3 Energie de dissociation d'une paire

Une question que l'on se pose lorsque l'on est peu habitué à ce genre de système est: mais d'où vient l'électron? et pourquoi n'y-a-t-il pas un terme traduisant l'énergie qu'il vient de quitter? Il apparaît là en plus. Il faut bien reconnaître que les ouvrages ne sont pas d'une grande clarté sur ce sujet.

On peut reformuler autrement la question et se demander quel est le coût énergétique de dissociation d'une paire.

Le problème est que le nombre de paires n'est pas fixé et que chacune appartient à une combinaison linéaire d'états  $|k, -k\rangle$ . On ne peut en aucun cas dire que l'on retire une paire d'un état  $|k, -k\rangle$  et que l'on met les électrons ailleurs.

La seule chose que l'on peut dire est que l'on retire deux électrons, on les fixe au sens des quasi-particules (avec leurs trous associés) sur les états  $|k, -k\rangle$  et  $|k', -k'\rangle$ . Les états bien identifiés  $|k, -k\rangle$  et  $|k', -k'\rangle$  sont retirés des états balayables et le reste des électrons s'organise pour le mieux en paires qui balaient les états disponibles.

Dissocier une paire, c'est créer 2 quasi-particules et l'énergie de dissociation ne se réfère pas à la paire mais aux états  $k$  et  $k'$  des deux quasi-particules.

Cela redonne tout son sens à la quasi-particule comme excitation d'un système BCS.

### IV-4 Dispersion des quasi-particules dans un métal normal

Considérons un métal normal à 0K, où tous les états sont occupés jusqu'à  $k = k_F$ . cet état est l'état fondamental.

L'énergie cinétique d'un électron dans l'état  $k$  est  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , et celle d'un électron au niveau de

Fermi  $\frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$ . L'écart d'énergie entre ces deux niveaux est (§ VIII-1 du chapitre X):

$$\zeta_k = \frac{\hbar^2 [k_F + (k - k_F)]^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_F}{m} (k - k_F)$$

Il est positif si  $k > k_F$  et négatif si  $k < k_F$ .

L'ajout d'un électron dans un état  $k > k_F$  apporte au système une énergie positive.  
 Le retrait d'un électron d'un état  $k < k_F$  retire au système une énergie négative, ce qui revient à dire que l'ajout d'un trou dans un état  $k < k_F$  apporte lui aussi une énergie positive.

L'électron au-dessous de  $k_F$  et le trou en dessous de  $k_F$  sont appelés des quasi-particules qui, toutes deux, ont des énergies positives et dont la relation de dispersion est:

$$E_k = \frac{\hbar^2 k_F}{m} |k - k_F|$$

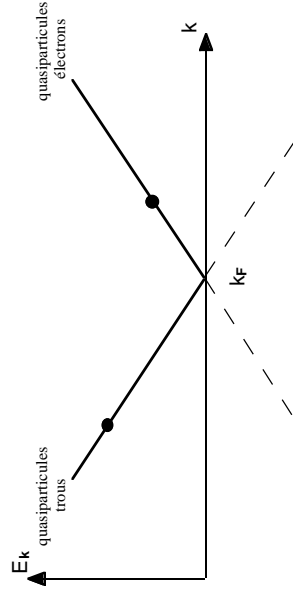


Figure 2

Dispersion des quasi-particules dans les métaux normaux

Le niveau  $k_F$  sépare parfaitement les quasi-particules électrons des quasi-particules trous.

On peut compléter le schéma de la courbe de dispersion par une partie pointillée, représentant les électrons en dessous du niveau de Fermi et les trous au-dessus du niveau de Fermi. Ce sont les niveaux occupés dans l'état fondamental. Ce serait donc la branche fondamentale de la courbe de dispersion par rapport à l'autre qui serait la branche des états excités.

Petite curiosité: la vitesse de déplacement des quasi-particules, qui est leur vitesse de groupe  $v_g = \frac{dE_k}{dk}$ , est positive pour les électrons et négatives pour les trous. Logiquement les électrons portent des charges négatives et les trous des charges positives.

Enfin le coût énergétique de transfert d'un électron d'un vecteur  $k < k_F$  à un vecteur  $k > k_F$  est égal à la somme des énergies de création d'un trou  $k$  et d'un électron  $k$ .

#### IV-5 Dispersion des quasi-particules des supraconducteurs

Une quasi-particule est étroitement liée à l'état  $k$  qu'elle occupe et dans lequel elle reste (sauf si elle interagit elle-même). A chaque état d'excitation  $k$  correspond une énergie  $E_k$ .

La relation de dispersion se déduit de l'expression de  $E_k$ :

$$E_k^2 = \Delta^2 + \zeta_k^2$$

avec au voisinage de  $k_F$ :

$$\zeta_k = \frac{\hbar^2 (k^2 - k_F^2)}{2m} \approx \frac{\hbar^2 k_F}{m} (k - k_F)$$

qui conduit à

$$E_k^2 \approx \Delta^2 + \frac{\hbar^4 k_F^2}{m^2} (k - k_F)^2$$

et à la courbe de dispersion de la figure 3.

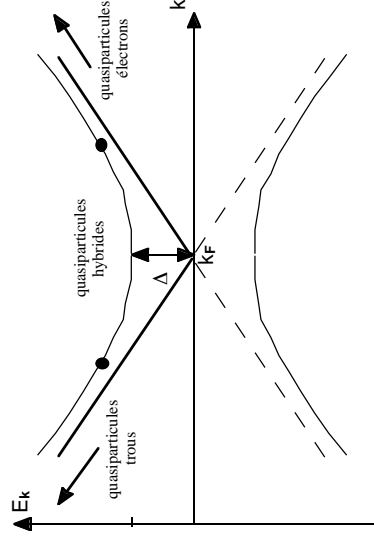


Figure 3

Courbe de dispersion des quasi-particules dans l'état supraconducteur:  
 $E_k > 0$  Etat excité  
 $E_k < 0$  Etat fondamental

Les asymptotes sont les courbes de dispersion du gaz d'électron normal

$E_k$  présente une branche d'énergie positive avec un minimum à  $\Delta$  à  $k_F$  que, à la lumière du paragraphe précédent, on peut interpréter ainsi:

- $k = k_F$   $v_k^2 = 1/2$ . le placement d'une quasi-particule ne change pas l'énergie cinétique.
- $E_k = \Delta$  L'énergie potentielle est augmentée car les paires ont un état de moins à balayer. cette augmentation est  $\Delta$ .
- $k \gg k_F$  On va ajouter un électron dans un état  $k$  que les paires ne balayaient pas.
- $E_k = \zeta_k$  L'énergie potentielle de balayage n'est pas affectée et le système gagne l'énergie cinétique  $\zeta_k$  de l'électron célibataire qui ressemble fort à un électron libre ordinaire d'un métal.
- $k \ll k_F$  Il s'agit du cas le plus délicat. On place un trou (en retirant un électron) dans un état  $k$  que les paires ne balayaient pas. De nouveau l'énergie potentielle de balayage n'est pas affecté et on enlève un électron là où l'énergie cinétique (avec le zéro au niveau de Fermi) est négative.

Il apparaît que, si loin de  $k_F$ , les quasi-particules peuvent être considérés comme de type électron ou de type trou en rejoignant les branches du métal normal, il n'en est plus de même au voisinage de  $k_F$  qui ne marque plus une frontière nette entre les deux

caractères, ce qui est étroitement lié au fait que le balayage des paires couvre des états situés de part et d'autre de  $k_F$ .

#### IV-6 Densité d'états des quasi-particules

Les états d'énergie  $E_k$  correspondant terme à terme aux états  $k$ , on a, si on appelle  $g(k)$  la densité d'états en  $k$  et  $D(E)$  la densité d'états en  $E$ :

$$g(k) dk = D(E) dE$$

Si on se place dans le modèle d'électrons libres, on a aussi la relation:

$$g(k) dk = g(\epsilon) d\epsilon$$

où  $g(\epsilon)$  est la densité d'états en énergie des électrons libres du métal normal qui, vu le domaine exploré, se trouve être de fait  $g(\epsilon_F)$ .

En tenant compte de la relation de dispersion  $E_k^2 = \Delta^2 + \zeta_k^2$ , on obtient comme densité d'états:

$$D(E) = \frac{g(\epsilon_F) E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}}$$

avec une branche supérieure des états excités et une branche inférieure de l'état fondamental.

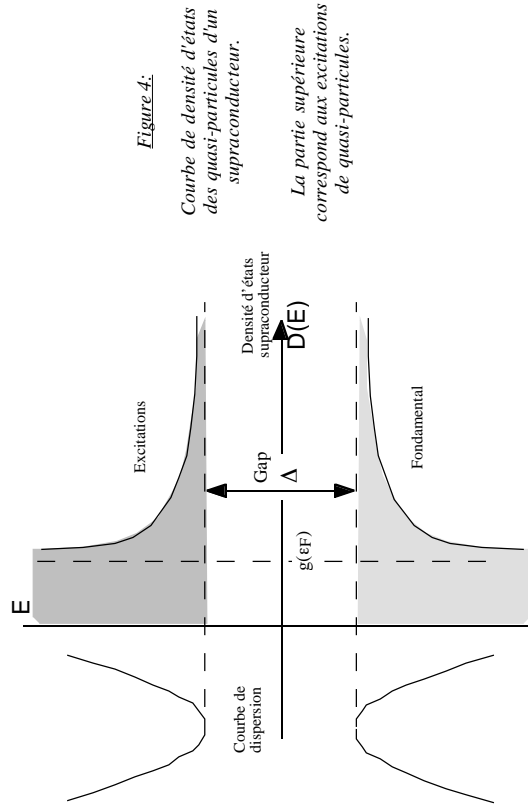


Figure 4:

Courbe de densité d'états des quasi-particules d'un supraconducteur.

La partie supérieure correspond aux excitations de quasi-particules.

#### IV-7 Paire excitée

Il nous reste à déterminer l'énergie nécessaire pour exciter une paire  $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$  telle que nous l'avons défini au paragraphe II-1 de ce chapitre.

D'après [TIL-p.129] et [KIT2-p.181] le coût énergétique de cette excitation est  $2E_k$ , 2 fois l'énergie nécessaire pour placer une quasi-particule sur cet état. La paire excitée est devenue une double quasi-particule.

#### V Excitations thermiques

##### V-1 Probabilité d'occupation des états

Le raisonnement présenté de façon la plus simple [BUR-p.30] est celui-ci:

soit  $f_k$ , probabilité qu'un électron se place sur un des états individuels  $\mathbf{k}$  ou  $-\mathbf{k}$  de l'état de paire  $|\mathbf{k}-\mathbf{k}\rangle$

$2f_k$  sera la probabilité que l'un ou l'autre des états  $\mathbf{k}$  ou  $-\mathbf{k}$  soit occupé par une quasi-particule et donc retiré des états balayables.  $|v_k|^2$ , probabilité de présence d'une paire dans l'état  $|\mathbf{k}-\mathbf{k}\rangle$ , est à remplacer par  $|v_k|^2 (1 - 2f_k)$ . En effet  $(1 - 2f_k)$  est la probabilité que l'état de paire existe et  $|v_k|^2$ , la probabilité que, si il existe, il soit occupé.

De la même façon, la probabilité d'une absence de paire dans l'état  $|\mathbf{k}-\mathbf{k}\rangle$  qui était  $|u_k|^2$ , est à remplacer par  $|u_k|^2 (1 - 2f_k)$  car pour parler d'absence de paire sur un état, il faut déjà qu'il existe.

On va donc remplacer de façon systématique dans le calcul des énergies:

$$v_k \longrightarrow v_k \sqrt{1 - 2f_k} \quad u_k \longrightarrow u_k \sqrt{1 - 2f_k}$$

Ce raisonnement peut ne pas paraître totalement convaincant, mais on a échappé au traitement de l'hamiltonien BCS en seconde quantification et en température. Cela vaut bien quelques sacrifices!

##### V-2 Nouveau paramètre

Nous avançons au paragraphe I-5 que la fonction d'onde du système était décrite par la succession des couples  $(u_k^*, v_k)$ :

$$|\Phi\rangle = \{ (u_{k1}^*, v_{k1}), (u_{k2}^*, v_{k2}), (u_k^*, v_k), (u_k^*, v_k), \dots \}$$

Il faut ajouter à chaque couple un nouveau paramètre  $f_k$  dont a priori nous ne connaissons rien.

Nous aurons à effectuer une minimisation de l'énergie libre  $\mathbf{k}$  par  $\mathbf{k}$  non seulement par rapport à  $u_{\mathbf{k}}$  et  $v_{\mathbf{k}}$ , mais aussi par rapport à  $f_{\mathbf{k}}$ .

### V-3 Energie libre

A température non nulle et à volume constant, la fonction à minimiser est l'énergie libre ou fonction de Helmholtz  $F = U - TS$ .

L'énergie  $U$  est égale à la somme de l'énergie des quasi-particules qui occupent les états  $\xi_{\mathbf{k}}$  avec la probabilité  $f_{\mathbf{k}}$  et des paires pour lesquelles on utilise la formule du paragraphe II-3 en effectuant les substitutions du paragraphe IV-1. Il vient:

$$U = \sum_{\mathbf{k}} 2 \xi_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} 2 \xi_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 (1 - 2f_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (1 - 2f_{\mathbf{k}})$$

L'entropie sera calculée en supposant que les quasi-particules sont des fermions, ce qui semble raisonnable puisqu'elles comportent toujours un électron. Sans a priori sur  $f_{\mathbf{k}}$ , et en repartant des premiers principes, on trouve sans difficulté (voir cours de physique statistique élémentaire):

$$S = \sum_{\mathbf{k}} \{ f_{\mathbf{k}} \log f_{\mathbf{k}} + (1 - f_{\mathbf{k}}) \log (1 - f_{\mathbf{k}}) \}$$

### V-4 Etat fondamental BCS à température non nulle

La minimisation de  $F$  par rapport à  $u_{\mathbf{k}}$ ,  $v_{\mathbf{k}}$  et  $f_{\mathbf{k}}$  conduit à une modification assez simple des résultats acquis au paragraphe II-3. L'ensemble des résultats reste valable avec une seule modification (de taille): celle de  $\Delta$  qui devient dépendant de la température et s'écrit:

$$\Delta(T) = V \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} [1 - 2f_{\mathbf{k}}(T)] \quad \text{avec} \quad \Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2 E_{\mathbf{k}}} [1 - 2f_{\mathbf{k}'}(T)]$$

où la fonction  $f_{\mathbf{k}}$  issue de la minimisation de l'énergie libre est:

$$f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{1 + \exp \frac{E_{\mathbf{k}}}{k_B T}}$$

qui ressemble à la fonction de Fermi habituelle.

Mais attention! les choses ne sont pas si simples car  $E_{\mathbf{k}}$  est fonction de  $T$  puisqu'il dépend de  $\Delta$  par  $E_{\mathbf{k}}^2 = \Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2$  et que  $\Delta$  dépend lui-même des  $f_{\mathbf{k}}$ :

$$f_{\mathbf{k}}(T) = \frac{1}{1 + \exp \frac{\sqrt{\Delta^2(T) + \xi_{\mathbf{k}}^2}}{k_B T}}$$

$E_{\mathbf{k}}$  croît lorsque l'on s'éloigne de part et d'autre de  $k_F$  où elle vaut  $\Delta(T)$ . A la température  $T$ ,  $f_{\mathbf{k}}(T)$  présente un maximum à  $k_F$  et s'étale sur une gamme de  $k$  couvrant le domaine d'énergie de l'ordre de  $2k_B T$  (à vérifier exactement).

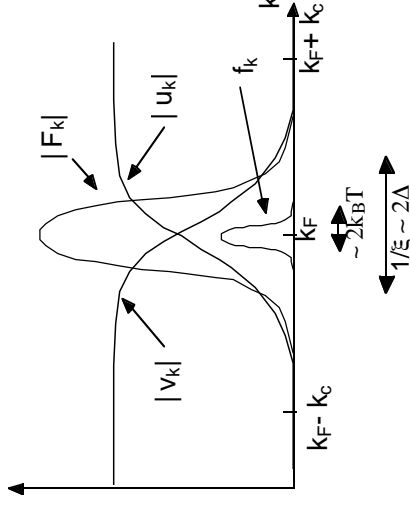


Figure 6:

Profil des amplitudes de probabilité d'occupation  $v_{\mathbf{k}}$  et de non-occupation  $u_{\mathbf{k}}$  des états de paires.

$F_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}$  est l'amplitude de condensation

$f_{\mathbf{k}}$  est la probabilité d'occupation des états de quasi-particules

### IV-5 Température critique

Il y a un phénomène de boucle que nous avons déjà évoqué au chapitre précédent.

A température nulle  $f_{\mathbf{k}}$  est nulle.  $\Delta$  a sa valeur maximale  $\Delta(0)$ .  $F(k)$  s'étale sur  $2\Delta(0)$ . Lorsque la température croît,  $f_{\mathbf{k}}$  devient non nulle et s'étale sur  $2k_B T$ . En créant des quasi-particules, elle neutralise des états de paire, ce qui a comme conséquence de diminuer le gap  $\Delta(T)$  et de ramasser  $F(k)$ .

De proche en proche,  $f(k)$  s'étale,  $F(k)$  se ramasse et  $\Delta$  diminue avec ses conséquences sur le nombre de paires supraconductrices et sur l'énergie de condensation qui toutes deux diminuent.

Il apparaît alors clair que, lorsque  $f_{\mathbf{k}}$  rattrape  $F_{\mathbf{k}}$ , les quasiparticules occupent une fraction énorme des états de paires et le gap s'écroule, ce qui se produit vers  $k_B T = \Delta(T)$ . La température critique est celle à laquelle le gap disparaît.

En repartant de l'équation:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2 E_{\mathbf{k}'}} [1 - 2f_{\mathbf{k}'}(T)]$$

Si on prend  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -V$ ,  $\Delta_{\mathbf{k}}$  devient une somme sur les seuls  $\mathbf{k}'$  qui est la même quel que soit  $\mathbf{k}$ , et comme précédemment  $\Delta(T)$  est une constante et:

$$1 = V \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2 E_{\mathbf{k}'}} [1 - 2f_{\mathbf{k}'}(T)]$$

avec:

$$1 - 2 f_k(T) = \text{th} \frac{E_k}{2 k_B T} = \frac{\sqrt{\Lambda^2 + \xi_k^2}}{2 k_B T}$$

et en passant à la limite continue avec la manière habituelle, on aboutit à l'équation:

$$1 = g(\epsilon_F) V \int_0^{\hbar \omega_D} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Lambda^2}} \text{th} \frac{\sqrt{\epsilon^2 + \Lambda^2}}{2 k_B T}$$

La température critique  $T_c$  est celle pour laquelle  $\Lambda = 0$ , soit:

$$1 = g(\epsilon_F) V \int_0^{\hbar \omega_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \text{th} \frac{\epsilon}{2 k_B T_c}$$

ce qui donne dans la limite du couplage faible  $g(\epsilon_F) V \ll 1$ :

$$k_B T_c = 1.14 \hbar \omega_D \exp(-1/g(\epsilon_F) V)$$

et si on se souvient de:

$$\Lambda(0) = 2 \hbar \omega_D \exp(-1/g(\epsilon_F) V)$$

on a la relation exprimée au chapitre précédent:

$$2\Lambda(0) = 3.52 k_B T_c$$

## VI Conséquences du modèle BCS

Elles ont été anticipées au paragraphe XI du chapitre précédent. Le modèle rend

compte:

- de la longueur de corrélation  $\xi$  et extension d'une paire (§ IX-5)
- du champ critique  $H_c$  (§ IV-4)
- de la relation de  $H_c$  avec les longueurs caractéristiques  $\lambda$  et  $\xi$  (§ IV-4)
- de la température critique (§ XII)
- de la relation entre température critique et champ critique (§ XII-3)
- de la densité de courant critique (§ XIII).
- de la discontinuité de chaleur spécifique à  $T_c$ .

## VII Du modèle microscopique au modèle de Ginzburg-Landau.

### VI-1 Paramètres d'ordre

En Ginzburg-Landau, le paramètre d'ordre est  $\psi$  (amplitude et phase) et  $|\psi|^2$  est la densité  $n_s$  de charges supraconductrices. Dans ce modèle, à 0K,  $n_s$  représente tous les

électrons libres : ceux des paires qui balayent les états de paire (qui sont relativement peu nombreux) mais aussi les électrons des niveaux inférieurs qui sont très majoritaires. Il faut bien prendre en compte tous ces électrons puisque, lorsqu'un courant circule, la sphère de Fermi (en  $\mathbf{k}$ ) se déplace globalement. L'énergie libre se développe selon:

$$f_{sH} = f_{n0} + \alpha |\psi|^2 + \frac{1}{2} \beta |\psi|^4 + \frac{1}{2m} |\frac{\hbar}{i} \nabla \psi - q\mathbf{A} \psi|^2 + \frac{\mathbf{B}^2}{2 \mu_0}$$

Le paramètre d'ordre chute à 0 à  $T_c$  et avec lui la densité  $n_s$ .

Dans le modèle microscopique que nous venons de développer, la quantité qui chute à 0 à  $T_c$  est le gap  $\Delta$  et il semblerait tout aussi logique de prendre le gap  $\Delta$  comme paramètre d'ordre d'autant plus qu'il s'agit d'une grandeur complexe. Le développement serait alors:

$$f_{sH} = f_{n0} + A |\Delta|^2 + \frac{1}{2} B |\Delta|^4 + C \left| \frac{\hbar}{i} \nabla \Delta - q\mathbf{A} \Delta \right|^2 + \frac{\mathbf{B}^2}{2 \mu_0}$$

L'idéal serait de montrer que ces deux équations sont équivalentes.

Cela est réalisé si :

$$\psi = \sqrt{2mC} \Delta$$

et à  $T=0$ , nous avons:

$$n_s = \psi(T=0)^2 = \sqrt{2mC} \Delta^2 (T=0)$$

$$C = \frac{n_s}{\sqrt{2m} \Delta(0)}$$

C'est ce qu'aurait fait Gor'kov, en comparant  $\psi$  et  $\Delta$  au voisinage de  $T_c$ , là où le développement de Landau est justifié [MAT-p.257]. Tinkham [TIN-p.105] dit dans son ouvrage que cette démonstration est "beyond the level of this presentation", inutile donc d'insister...

Ce lien entre  $\psi$  et  $\Delta$  sera mis à profit pour comprendre la chute de la supraconductivité dans des situations complexes où il est plus facile de rendre compte d'une fermeture du gap que de l'évolution de  $\psi$ .

Enfin les effets d'interface et de proximité qui traduisaient la décroissance de  $\psi$  au voisinage d'une surface et son prolongement éventuel dans un métal normal se déplacent vers la décroissance de  $\Delta$  et son origine microscopique.