Theoretische Physik V

SS 2016 **23.05.2016**
Blatt 5 **Fälligkeitsdatum 30.05.2016**

Aufgabe 1: Magnonenspektrum

In der Vorlesung wurden die Wechselwirkungsenergien anhand der entsprechenden Feynman-diagramme diskutiert. Der Wechselwirkungsterm in der Elektron-Loch-Darstellung lautet

$$
\begin{aligned}
\hat{H}^{(2)}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} &= \langle \mathrm{eh}_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{q}} | \hat{H}^{(2)} | \mathrm{eh}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}} \rangle \;, \\
|\mathrm{eh}_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}\rangle &= \Theta(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\downarrow,\uparrow) \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}/2,\downarrow} \hat{c}_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}/2,\uparrow} |g\rangle \\
\hat{H}^{(2)} &= \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\boldsymbol{l},\boldsymbol{l}',\boldsymbol{q}'} \sum_{\sigma,\sigma'} U(\boldsymbol{q}') \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{l}+\boldsymbol{q}',\sigma} \hat{c}^{\dagger}_{\boldsymbol{l}'-\boldsymbol{q}',\sigma'} \hat{c}_{\boldsymbol{l}',\sigma'} \hat{c}_{\boldsymbol{l},\sigma} \,.
\end{aligned}
$$

Zeigen Sie, dass man für $\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k}$ die Hartree- und Fock-Korrekturen erhält und identifizieren Sie diese mit den entsprechenden Feynman-Diagrammen.
(*Hinweis: Betrachten Sie jede mögliche Kombination von σ und σ' separat.*) *(6 Punkte)*

Aufgabe 2: Bogoliubov- de Gennes Gleichung

In dieser Aufgabe wird ein alternatives Modell zur Beschreibung eines supraleitenden Metalls hergeleitet. Die Grundidee besteht darin, dass ein effektiver Hamilton für den supraleitenden Zustand eingeführt wird und dieser dann durch eine Transformation auf eine Quasiteilchen-Form gebracht wird. Die Gleichung die diese Transformation beschreibt ist die sogenannte Bogoliubov- de Gennes Gleichung.

a) In der Vorlesung wurde angenommen, dass nur Terme mit $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$ große Beiträge zur Energie im Wechselwirkungsterm des Hamiltons liefern. Diese Annahme spiegelt sich in den Gleichungen durch die Näherung $\langle \hat{\Delta}^{\dagger}\hat{\Delta} \rangle \approx \langle \hat{\Delta}^{\dagger} \rangle \langle \hat{\Delta} \rangle$ wieder. Zeigen Sie unter derselben Annahme, dass für den effektiven supraleitenden Hamiltonterm

$$
\hat{H}_S = \hat{H}^{(1)} + \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow} + \Delta^* \hat{c}_{-\mathbf{k},\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow} \right) \tag{1}
$$

mit komplexem Parameter Δ und

$$
\hat{H}^{(1)} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} E(\mathbf{k}) \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma} - \mu \hat{N} \equiv \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k},\sigma} \tag{2}
$$

dass die Gesamtenergie eines Supraleiters für einen beliebigen Zustand $|\Psi\rangle$ gegeben ist durch

$$
\begin{aligned}
E = &\min\nolimits_{\Delta} \left\{ \langle \Psi | \hat{H}_S | \Psi \rangle + \frac{V}{|U|} |\Delta|^2 \right\} \\
\approx &\langle \Psi | \left(\hat{H}^{(1)} + \hat{H}^{(2)} \right) | \Psi \rangle \,.
\end{aligned} \tag{3}
$$

Zeigen Sie, dass der optimale Wert von Δ konsistent ist mit dem zuvor behandeltem Modell (bei welchem $\hat{\Delta} \equiv \frac{U}{V} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow} \hat{c}^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow}$ war). *(4 Punkte)*

Hinweis: Minimieren Sie die Energie bzgl. Δ^* und leiten Sie diesen Ausdruck ab, um einen Ausdruck für das optimale Δ zu erhalten.

b) Für einen inhomegenen Supraleiter nimmt der Hamiton folgende Gestalt an:

$$\hat{H}_S = \sum_{n,m} \left(H_{nm} \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_m + \frac{1}{2} \Delta_{nm} \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_m^\dagger + \frac{1}{2} \Delta_{nm}^* \hat{c}_n \hat{c}_m \right) \tag{4}$$

Warum ist Δ_{nm} antisymmetrisch? Zeigen Sie, dass $\hat{H}_S$ geschrieben werden kann als

$$\hat{H}_S = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \sum_{n,m} \hat{d}_{n,\alpha}^\dagger \mathcal{H}_{n,\alpha;m,\beta} \hat{d}_{m,\beta} + E_0, \tag{5}$$

wobei die Matrix $\mathcal{H}$ im Raum $\{\alpha, \beta\}$ gegeben ist duch

$$\mathcal{H} \begin{pmatrix} \check{H} & \check{\Delta} \\ \check{\Delta}^\dagger & -\check{H}^T \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Die mit einem "check"versehenen Matrizen (wie z.B. $\check{H}$) besitzen weiterhin die Indices nm. Sowohl α als auch β können die beiden Werte e oder h annehmen, def. durch $\hat{d}_{n,e} \equiv \hat{c}_n$ und $\hat{d}_{n,h} \equiv \hat{c}_n^\dagger$. Bestimmen Sie E_0. *(2 Punkte)*

c) $\mathcal{H}$ ist hermitesch und kann daher durch seine Eigenfunktionen $\Psi_k(n, \alpha)$ und Eigenwerte E_k ausgedrückt werden, wobei k die Eigenwerte indiziert. Zeigen Sie, dass $\hat{H}_S$ in dieser Basis folgende Form annimmt:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_k \hat{\gamma}_k^\dagger E_k \hat{\gamma}_k + E_0. \tag{7}$$

$\hat{\gamma}_k$ erhält man hier aus $\hat{d}_{n,\alpha}$ mit Hilfe von Ψ_k^*. Drücken Sie γ_k durch $\hat{d}_S$ aus. *(3 Punkte)*

d) Beweisen Sie folgende Eigenschaft von $\mathcal{H}$: Es sei $\Psi_{n,\alpha} = (\Psi_{n,e}, \Psi_{n,h})$ eine Eigenfunktion von $\mathcal{H}$ zum Eigenwert E, dann ist $\bar{\Psi}_{n,\alpha} = (\Psi_{n,e}^*, \Psi_{n,h}^*)$ Eigenfunktion von $\mathcal{H}$ zum Eigenwert $-E$. Eigenzustände entgegengesetzer Energien seien durch $-k$ bezeichnet, sodass $E(k) = -E(-k)$ und $\bar{\Psi}_k = \Psi_{-k}$. Leiten Sie her, wie die Operatoren $\hat{\gamma}_k$ für entgegengesetzte Energien miteinander zusammenhängen. Nutzen sie die orthogonalitätseigenschaften der Eigenfunktionen von $\mathcal{H}$ um zu zeigen, dass folgende Antikommutator-Relationen gelten:

$$\begin{aligned} \{\hat{\gamma}_k, \hat{\gamma}_{k'}\} &= 0 \\ \{\hat{\gamma}_k^\dagger, \hat{\gamma}_{k'}\} &= \delta_{kk'}, \end{aligned} \tag{8}$$

wobei $k \neq -k'$. *(4 Punkte)*

e) Zeigen Sie, dass man den Hamilton aus b) schreiben kann als

$$\hat{H}_S = \sum_{k, E_k > 0} \hat{\gamma}_k^\dagger E_k \hat{\gamma}_k + E_g \tag{9}$$

und geben Sie E_g explizit an. Wieso gibt Gl. (9) die Grundzustandsenergie, sowie das Anregungsspektrum eines Supraleiters an? *(2 Punkte)*

f) Geben Sie die Bogoliubov- de Gennes Gleichungen für einen homogenen Supraleiter an und lösen Sie diese, wobei $n = (\mathbf{k}, \sigma)$. Wie hängen u und v mit den Eigenfunktionen von $\mathcal{H}$ zusammen? Welche Eigenfunktionen lassen sich Elektronen mit Spin-up und Löchern mit Spin-down und welche Elektronen mit Spin-down und Löchern mit Spin-up zuordnen? *(4 Punkte)*

g) Bestimmen (nicht lösen...) Sie die Bogoliubov- de Gennes Gleichungen für eine Koordinatendarstellung des effektiven Hamiltons

$$\hat{H}_S = \int d\mathbf{r} \big[\sum_\sigma \hat{\Psi}^\dagger_\sigma(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \mu + V(\mathbf{r}) \right\} \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r}) \Psi^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}) \Psi^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}) + \Delta^*(\mathbf{r}) \Psi_\uparrow(\mathbf{r}) \Psi_\downarrow(\mathbf{r}) \big].$$

Nutzen Sie die Spinstruktur aus, welche Sie in f) gefunden haben. *(3 Punkte)*

Aufgabe 3: Elektronen und Phononen

Die Elektronen in Metall sind durch das Kristallgitter gekoppelt. Die Anregungen dieses Gitters sind Phononen also Bosonen. Die Frequenz $\omega_{\mathbf{q}}$ dieser Anregungen hängen ab vom Wellenvektor $\mathbf{q}$ der Phononen; es gilt $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_{-\mathbf{q}}$. Der Hamilton ist

$$\begin{aligned} \hat{\mathrm{H}} &= \hat{\mathrm{H}}_{el} + \hat{\mathrm{H}}_{ph} + \hat{\mathrm{H}}_{el-ph} \\ \hat{\mathrm{H}}_{el} &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma}, \ \hat{\mathrm{H}}_{ph} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_{\mathbf{q}} \hat{b}^\dagger_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{q}}, \\ \hat{\mathrm{H}}_{el-ph} &= \lambda \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\sigma} \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}}{\nu(0)N}} \left(\hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1} + \hat{b}_{\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2} \right) \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}_1,\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}_2,\sigma} \end{aligned}$$

$\hat{c}$ und $\hat{b}$ sind die Elektronen- und Phononenvernichteroperatoren, $\nu(0)$ die Elektronenzustandsdichte an der Fermienergie und $\lambda \ll 1$ die dimensionslose Stärke der Wechsewirkung. Zweite Ordung Terme in λ führen zu effektiver Elektron–Elektron Wechselwirkung und letztendlich zu Supraleitung. Ohne Elektron-Phonon Wechselwirkung ist der Grundzustand des Systems $|g\rangle$ dergestalt, dass alle Zustände unterhalb der Fermienergie E_F besetzt sind und keine Phononen angeregt sind.

a) Betrachten Sie angeregte Zustände $|p_{\mathbf{k}}\rangle = hatc^\dagger_{\mathbf{k},\uparrow} \hat{c}^\dagger_{-\mathbf{k},\downarrow} |g\rangle$ mit $|\mathbf{k}| > k_F$ (Cooper-Paare mit verschwindenden Gesamtimpuls). Projizieren Sie die Schrödingergleichung des gesamten Hamiltonoperators für den Eigenwert E auf den Unterraum dieser Zustände. Zeigen Sie, dass diese auf eine Schrödingerartige Gleichung für den Operator

$$\sum_{\mathbf{k}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} 2\varepsilon_k |p_k\rangle \langle p_k| + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} H^{(eff)}_{\mathbf{k}\mathbf{k'}}(E) |p_{\mathbf{k}}\rangle \langle p_{\mathbf{k}'}| ,$$

mit

$$H^{(eff)}_{\mathbf{k}\mathbf{k'}}(E) = \langle p_{\mathbf{k}}| \hat{\mathrm{H}}_{el-ph} \frac{1}{E - \hat{\mathrm{H}}^*} \hat{\mathrm{H}}_{el-ph} |p'_{\mathbf{k}}\rangle .$$

Was ist $\hat{\mathrm{H}}^*$? *(4 Punkte)*

b) Berechnen Sie die Matrixelemente in zweiter Ordnung in λ. Betrachten Sie die Fälle $E \ll \hbar\omega_0$ und $E \gg \hbar\omega_0$, wobei ω_0 eine typische Phononenfrequenz ist. Zeigen Sie, dass im ersten Fall die Matrixelemente eine effektive Elektron-Elektron-Wechselwirkung der Form

$$\hat{\mathrm{H}}^{(2)} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \hat{c}^\dagger_{\mathbf{k}_1,\uparrow} \hat{c}^\dagger_{-\mathbf{k}_1,\downarrow} U(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2) \hat{c}{-}\mathbf{k}_2, {\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}_2,\uparrow}$$

ergeben, wobei das Vorzeichen von U einer Anziehung entspricht. Geben Sie einen Ausdruck für $U(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2)$ an. *(4 Punkte)*

c) Eine essentielle Eigenschaft der gefundenen Anziehung ist, dass sie für Elektronenergien größer als die involvierten Phononenenergien stark abfällt. Da typische Phononenenergien zwei Größenordungen kleiner sind als die typische Fermienergie gibt es nur eine Anziehung zwischen Elektronen nahe der Fermioberfläche. Nehmen Sie ein einfaches Modell an.

$$U(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -|U_0|\Theta(\hbar\omega_0 - |\varepsilon_{\mathbf{k}_1}|)\Theta(\hbar\omega_0 - |\varepsilon_{\mathbf{k}_2}|)$$

Lösen Sie die Gleichungen für die Anregungsenergien und zeigen Sie, dass diese negative Lösungen erlauben. Dies widerspricht der Tatsache, dass es die Energien angeregte Zustände sind und beweist den Übergang zu einem qualitativ anderen Grundzustand, dem eines Supraleiters. *(4 Punkte)*