Universität Bonn 23.05.2008
Physikalisches Institut
Prof. Dr. H. Kroha, T. Langenbruch
http://www.th.physik.uni-bonn.de/th/Groups/kroha

Theoretische Festkörperphysik — SS2008

Übungszettel 5

(Abgabe Do 20.06.08)

5.1 BCS-Variationsmethode

In der Vorlesung wurden der BCS-Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \qquad (1) \\ \epsilon_{\mathbf{k}} &= \epsilon^0_{\mathbf{k}} - \mu \end{aligned}$$

und der BCS-Grundzustand

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow}) |FS\rangle \qquad (2)$$

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \qquad (3)$$

eingeführt, wobei

$$\begin{aligned} \lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} &= -V \quad \text{falls } |\epsilon_{\mathbf{k}}| \text{ und } |\epsilon_{\mathbf{k}'}| \leq \hbar\omega_d \\ \lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} &= 0 \quad \text{sonst} \end{aligned}$$

und $\hbar\omega_d$ die Debey-Frequenz ist.
Wir benutzen in dieser Aufgabe eine äquivalente Darstellung des BCS-Grundzustandes in der Paare aus dem Vakuum erzeugt, statt im Fermisee vernichtet werden:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}) |0\rangle$$

Wir möchten nun mit Hilfe der Variationsmethode die Grundgleichungen der BCS-Theorie herleiten.Dazu minimieren wir den Erwartungswert des Hamiltonoperators bezüglich $|\Psi_{BCS}\rangle$, indem wir $u_{\mathbf{k}}$ und $v_{\mathbf{k}}$ variieren, dass heißt:

$$\delta\langle\Psi_{BCS}|H|\Psi_{BCS}\rangle = 0$$

a) Zeigen Sie hierzu zunächst, dass für den Erwartungswert des Hamiltonoperators in Bezug auf den BCS-Grundzustand gilt (wir nehmen $u_{\mathbf{k}}$ und $v_{\mathbf{k}}$ als reell an):

$$\langle\Psi_{BCS}|H|\Psi_{BCS}\rangle = 2\sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \qquad (4)$$

Hinweis: Ordnen Sie dafür das Produkt nach Faktoren jeweils gleicher Indizes.

b) Wir setzen nun $u_{\mathbf{k}}$ und $v_{\mathbf{k}}$ als

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \sin(\theta_k) \\ v_{\mathbf{k}} &= \cos(\theta_k) \end{aligned}$$

an, um Nebenbedingung (3) zu erfüllen. Zeigen Sie, dass sich Gleichung (4) dann folgendermaßen umformulieren läßt:

$$\langle \Psi_{BCS}|H|\Psi_{BCS}\rangle = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}(1+\cos(2\theta_{\mathbf{k}})) + \frac{1}{4}\sum_{\mathbf{kk}'} \lambda_{\mathbf{kk}'}\sin(2\theta_{\mathbf{k}})\sin(2\theta_{\mathbf{k}'}) \tag{5}$$

c) Minimieren Sie nun den Erwartungswert, indem Sie

$$\frac{\partial}{\partial \theta_{\mathbf{k}''}}\langle \Psi_{BCS}|H|\Psi_{BCS}\rangle \stackrel{!}{=} 0$$

setzen, und zeigen Sie, dass dann folgt:

$$\tan(2\theta_{\mathbf{k}}) = \frac{\sum_{\mathbf{k}'} \lambda_{\mathbf{kk}'}\sin(2\theta_{\mathbf{k}'})}{2\epsilon_{\mathbf{k}}} \tag{6}$$

d) Wir definieren jetzt

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} \lambda_{\mathbf{kk}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}'} \lambda_{\mathbf{kk}'}\sin(2\theta_{\mathbf{k}'}) \tag{7}$$

$$E_{\mathbf{k}} = (\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2)^{\frac{1}{2}} \tag{8}$$

Zeigen Sie, dass damit aus (6) folgt:

$$\tan(2\theta_{\mathbf{k}}) = -\frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}}} \tag{9}$$

$$2u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}} = \sin(2\theta_{\mathbf{k}}) = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tag{10}$$

$$v_{\mathbf{k}}^2 - u_{\mathbf{k}}^2 = \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) = -\frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tag{11}$$

Anmerkung: Die Namensgebung dieser Größen ist natürlich nicht zufällig. Es handelt sich bei $E_{\mathbf{k}}$ um die Anregungsenergie eines Quasiteilchens mit Ibetrachtenmpuls $\mathbf{k}$. $\Delta_{\mathbf{k}}$ wird sich als impulsunabhängig herausstellen und beschreibt die minimale Anregungsenergie eines Quasiteilchens.

e) Setzen Sie nun Gleichung (10) in (7) ein und zeigen Sie, dass Sie hieraus folgende Selbstkonsistenz-Gleichung für $\Delta_{\mathbf{k}}$ erhalten:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{(\Delta_{\mathbf{k}'}^2 + \epsilon_{\mathbf{k}'}^2)^{\frac{1}{2}}}\lambda_{\mathbf{kk}'} \tag{12}$$

f) Machen Sie sich nun an (12) unter Ausnutzung der Definition von $\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ klar, dass $\Delta_{\mathbf{k}}$ in diesem Modell **k**-unabhängig ist, also dass:

$$\begin{aligned}\Delta_{\mathbf{k}} &= \Delta \text{ für } |\epsilon_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_d \\ \Delta_{\mathbf{k}} &= 0 \text{ für } |\epsilon_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_d\end{aligned}$$

Schreiben Sie nun, unter Annahme eines konstanten Δ, Gleichung (12) in einfachster Form auf.

g) Zeigen Sie nun unter Ausnutzung von (11) und (3), dass

$$\begin{aligned}v_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) \\ u_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2}\left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right)\end{aligned}$$

Tragen Sie $v_{\mathbf{k}}^2$ gegen $\epsilon_{\mathbf{k}}$ auf und interpretieren Sie das Ergebnis.

5.2 Temperaturabhängige BCS-Gleichung

Wir untersuchen nun die BCS-Gleichung

$$1 = VN(0)\int_{-\hbar\omega_d}^{\hbar\omega_d} \frac{\tanh\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2+\Delta^2}}{2T}\right)}{2\sqrt{\epsilon^2+\Delta^2}}d\epsilon \qquad (13)$$

aus der Vorlesung.

a) Wir möchten zunächst den Limes $T \to 0$ betrachten. Zeigen Sie, dass Gleichung (13) dann Gleichung (12) in einfachster Form (aus Aufgabe **4.1 f)**) entspricht. Nehmen Sie dafür eine Konstante Zustandsdichte N(0) an, um die Summation über k' in Gleichung (12) in ein Integral umzuschreiben.
Zeigen Sie dann im Limes schwacher Kopplung $N(0)V << 1$, dass Sie für $T \to 0$ aus (13) folgende Gleichung für die minimale Anregungsenergie erhalten:

$$\Delta \approx 2\hbar\omega_d \exp\left(-\frac{1}{N(0)V}\right) \qquad (14)$$

b) Setzen Sie nun $\Delta = 0$ (Übergangspunkt) und lösen Sie Gleichung (13) nach der Temperatur auf, um die kritische Temperatur T_c zu bestimmen. Zeigen Sie, dass:

$$T_c \approx 1.14\ \hbar\omega_d \exp\left(-\frac{1}{N(0)V}\right)$$

Benutzen Sie dazu, dass

$$\int_0^y \frac{\tanh(x)}{x}dx = \ln(2Ay)$$

wobei $A = 2e^\gamma/\pi \approx 1.14$ und γ die Eulerkonstante ist.