Technische Universität Dresden
Institut für Theoretische Physik

Prof. Dr. M. Vojta
Dr. L. Janssen
T. Micallo

Theoretische Physik (Master)
6. Übung

Wintersemester 2020/21

1. Bogoliubov-Transformation für Bosonen **4 Punkte**

Eine allgemeine Form eines bilinearen Hamilton-Operators ist $\hat{H} = \vec{a}^\dagger \, \mathcal{H} \, \vec{a}$ mit $\vec{a} = (\hat{\alpha}_1, \ldots, \hat{\alpha}_n)^T$, wobei $\mathcal{H} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ eine hermitesche Matrix und $\vec{a}$ ein n-komponentiger Vektor von zweit-quantisierten Operatoren $\hat{\alpha}_i$ ist.

a) **1 Punkt**

Betrachten Sie zunächst den Fall, dass alle $\hat{\alpha}_i$ Vernichtungsoperatoren sind, d.h. $[\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j^\dagger]_\pm = \delta_{ij}$ mit $[\hat{A}, \hat{B}]_\pm = \hat{A}\hat{B} \pm \hat{B}\hat{A}$ und $+$ $(-)$ für Fermionen (Bosonen). Um $\hat{H}$ zu diagonalisieren, können Sie nun eine allgemeine Basis-Transformation $\vec{a} = U \, \vec{b}$ betrachten, wobei $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ eine bisher noch nicht weiter spezifizierte Matrix ist. Zeigen Sie, dass U unitär sein muss, damit diese Transformation die (Anti-)Vertauschungsrelationen der Operatoren erhält (und damit also $[a_i, a_j^\dagger]_\pm = [b_i, b_j^\dagger]_\pm$ gilt). Warum ist die Erhaltung der (Anti-)Vertauschungsrelationen eine sinnvolle Forderung?

b) **1 Punkt**

Betrachten Sie nun den Fall, dass $\mathcal{H}$ eine komplexe (2×2)-Matrix und $\vec{a} = (\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2^\dagger)$ ist, wobei weiterhin $[\hat{\alpha}_i, \hat{\alpha}_j^\dagger]_\pm = \delta_{ij}$ gelten soll. Für Fermionen ist diese Situation in einem Supraleiter realisiert. Zeigen Sie, dass die allgemeine Transformation $\vec{a} = U \, \vec{b}$ für Bosonen dann die Relation $U\sigma^z U^\dagger = \sigma^z$ erfüllen muss, um die Vertauschungsrelationen zu erhalten. Hierbei ist $\sigma^z = \mathrm{diag}(1, -1)$ die dritte Pauli-Matrix. Welche Relation erfüllt die Matrix U im fermionischen Fall?

c) **1 Punkt**

Nehmen Sie im Folgenden an, dass U nur reelle Einträge hat. Zeigen Sie, dass U im bosonischen Fall dann die Form

$$U = \begin{pmatrix} u & v \\ v & u \end{pmatrix} \tag{1}$$

mit $u^2 - v^2 = 1$ hat. Zeigen Sie weiterhin, dass U eine symplektische Matrix ist.

Hinweis: Eine symplektische Matrix M ist eine $(2m \times 2m)$-Matrix mit reellen Einträgen, welche die Bedingung $M^T \Omega M = \Omega$ mit $\Omega = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_m \\ -\mathbb{1}_m & 0 \end{pmatrix}$ erfüllt. Hier bezeichnet $\mathbb{1}_m$ die $(m \times m)$-Einheitsmatrix.

d) **1 Punkt**

Nutzen Sie die Ergebnisse der vorherigen Aufgabenteile, um die Eigenenergien eines bosonischen Hamilton-Operators mit

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E & \lambda \\ \lambda & E \end{pmatrix} \tag{2}$$

zu finden. Hierzu können Sie $u = \cosh(\theta)$ und $v = \sinh(\theta)$ setzen und Additionstheoreme für die Hyperbelfunktionen nutzen.

2. Variationelle BCS-Wellenfunktion **3 Punkte**

In dieser Aufgabe sollen Sie mittels einer Variationsrechnung eine Näherung für die Grundzustandswellenfunktion eines Supraleiters untersuchen. Startpunkt ist dabei der Hamilton-Operator

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{l}} \frac{V_{\mathbf{kl}}}{\mathcal{N}} c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow} c^\dagger_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow}. \tag{3}$$

Hierbei ist $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} = c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}$, wobei $c_{\mathbf{k}\sigma}$ den Vernichtungsoperator für ein Elektron mit Impuls $\mathbf{k}$ und Spin σ bezeichnet, und $\mathcal{N}$ ist die Anzahl der Impulse $\mathbf{k}$. Weiterhin gilt $\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{-\mathbf{k}}$, und $V_{\mathbf{kl}}$ beschreibt eine nur in der Nähe der Fermifläche wirkende attraktive Wechselwirkung mit

$$V_{\mathbf{kl}} = \begin{cases} -V & |\xi_{\mathbf{k}}|, |\xi_{\mathbf{l}}| < \omega_{\mathrm{D}} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{4}$$

und $V > 0$. Der natürliche Cutoff dieser Niederenergie-Theorie ist die Debye-Frequenz ω_{D}. In der BCS-Molekularfeldnäherung ist die Grundzustandswellenfunktion durch

$$|\Psi\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow} c^\dagger_{-\mathbf{k}\downarrow}) |0\rangle. \tag{5}$$

gegeben, wobei $u_{\mathbf{k}}$ und $v_{\mathbf{k}}$ noch zu bestimmende Koeffizienten sind, und $|0\rangle$ das nicht-wechselwirkende Vakuum bezeichnet (es gilt also $c_{\mathbf{k}\sigma}|0\rangle = 0 \;\forall\, \mathbf{k}, \sigma$). Die Koeffizienten $u_{\mathbf{k}}$ und $v_{\mathbf{k}}$ sollen im Folgenden unter der Randbedingung

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \tag{6}$$

bestimmt werden.

Hinweis: Gleichung (6) hat eine probabilistische Interpretation: $|v_{\mathbf{k}}|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, ein Cooper-Paar mit Impuls $\mathbf{k}$ im Grundzustand zu haben.

a) **1 Punkt**

Zeigen Sie, dass der Grundzustandserwartungswert von $\hat{K}$ als Funktion von $u_{\mathbf{k}}$ und $v_{\mathbf{k}}$ im thermodynamischen Limes durch

$$\langle\Psi|\hat{K}|\Psi\rangle \approx 2\sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 + \sum_{\mathbf{kl}} \frac{V_{\mathbf{kl}}}{\mathcal{N}} u^*_{\mathbf{l}} v^*_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{l}} \tag{7}$$

gegeben ist. Minimieren Sie Gleichung (7) unter Beachtung von Gleichung (6). Wählen Sie die reelle Parametrisierung $u_{\mathbf{k}} = \sin\theta_{\mathbf{k}}$ und $v_{\mathbf{k}} = \cos\theta_{\mathbf{k}}$ um die Gleichung

$$\tan 2\theta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{l}} \frac{V_{\mathbf{kl}}}{\mathcal{N}} \frac{\sin 2\theta_{\mathbf{l}}}{2\xi_{\mathbf{k}}} =: -\Delta_{\mathbf{k}}/\xi_{\mathbf{k}} \tag{8}$$

für $\theta_{\mathbf{k}}$ herzuleiten, in der $\Delta_{\mathbf{k}}$ die sogenannte Gap-Funktion bezeichnet.

b) **1 Punkt**

Nutzen Sie nun die Definition $E_{\mathbf{k}} = (\Delta^2_{\mathbf{k}} + \xi^2_{\mathbf{k}})^{1/2}$, um $u_{\mathbf{k}}$ und $v_{\mathbf{k}}$ als Funktion von $\xi_{\mathbf{k}}$, $\Delta_{\mathbf{k}}$ und $E_{\mathbf{k}}$ zu schreiben. $E_{\mathbf{k}}$ kann als das Spektrum des Supraleiters interpretiert werden. Formen Sie unter der Annahme $\Delta_{\mathbf{k}} \geq 0$ Gleichung (8) zu

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{l}} \frac{\Delta_{\mathbf{l}}}{E_{\mathbf{l}}} \frac{V_{\mathbf{kl}}}{\mathcal{N}} \tag{9}$$

um. Nutzen Sie den expliziten Ausdruck von $V_{\mathbf{kl}}$, um eine nicht-triviale Lösung für Gleichung (9) im Fall $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta > 0$ für $|\xi_{\mathbf{k}}| < \omega_{\mathrm{D}}$ zu finden.

Anleitung: Ersetzen Sie das Impuls-Integral durch ein Energie-Integral, in dem Sie die Zustandsdichte durch ihren Wert an der Fermi-Energie annähern, und nehmen Sie $\omega_{\mathrm{D}} \gg \Delta$ an. Verwenden Sie die Additionstheoreme für trigonometrische Funktionen um ausgehend von Gleichung (8) die Ausdrücke für $|u_{\mathbf{k}}|^2$ und $|v_{\mathbf{k}}|^2$ zu finden.

c) **1 Punkt**

Mittels der kanonischen Bogoliubov-Transformation für Femionen kann man zeigen, dass die Gap-Gleichung bei endlichen Temperaturen die Form

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{l}} \frac{\Delta_{\mathbf{l}}}{E_{\mathbf{l}}} \frac{V_{\mathbf{kl}}}{\mathcal{N}} \tanh(\beta E_{\mathbf{l}}/2) \tag{10}$$

annimmt. Nutzen Sie Gleichung (10), um die kritische Temperatur T_{c} zu bestimmen.

Hinweis: bei T_{c} können Sie $E_{\mathbf{l}} = |\xi_{\mathbf{l}}|$ setzen.