Theorie der Kondensierten Materie I WS 2014/2015

Prof. Dr. A. Mirlin, Dr. I. Gornyi
U. Briskot, N. Kainaris, Dr. E. König

Blatt 13: Lösungen
Besprechung 05.02.2015

---

1. BCS-Grundzustand (1+3+3+3+3+3 = 16 Punkte)

Aus der Vorlesung ist bekannt, dass die BCS-Wellenfunktion

$$|\Phi_{\rm BCS}\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}} \left(u_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right)|0\rangle$$

lautet.

(a) Zeigen Sie, dass $|\Phi_{\rm BCS}\rangle$ normiert ist, wenn $|u_{\boldsymbol{k}}|^2 + |v_{\boldsymbol{k}}|^2 = 1$ für alle $\boldsymbol{k}$.
Lösung:
Der Zustand $|0\rangle$ bezeichnet den Vakuumszustand der $c_{\boldsymbol{k},\sigma}$ und somit

$$c_{\boldsymbol{k},\sigma}|0\rangle = \langle 0|c^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma} = 0\,, \qquad \forall\, \mathbf{k}, \sigma\,. \tag{1}$$

Unter Verwendung dieser Eigenschaft berechnen wir

$$\begin{aligned}\langle \Phi_{\rm BCS}|\Phi_{\rm BCS}\rangle =& \langle 0|\prod_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\left(u^*_{\boldsymbol{k}'} + v^*_{\boldsymbol{k}'} c_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} c_{\boldsymbol{k}'\uparrow}\right)\left(u_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right)|0\rangle \\ =& \prod_{\boldsymbol{k}}\left[u^*_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} + v^*_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \langle 0|c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}|0\rangle\right] \\ =& \prod_{\boldsymbol{k}}\left(|u_{\boldsymbol{k}}|^2 + |v_{\boldsymbol{k}}|^2\right).\end{aligned} \tag{2}$$

Im ersten Schritt haben wir verwendet dass im Produkt nur die Terme einen endlichen Vakuumserwartungswert haben, die eine gleiche Anzahl von Erzeugern und Vernichtern haben. Zudem haben wir verwendet, dass

$$\prod_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} u^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}} = u^*_{\boldsymbol{k}_1} u^*_{\boldsymbol{k}_2}\cdots u^*_{\boldsymbol{k}_N} u_{\boldsymbol{k}_1} u_{\boldsymbol{k}_2}\cdots u_{\boldsymbol{k}_N} = \prod_{\boldsymbol{k}} |u_{\boldsymbol{k}}|^2\,. \tag{3}$$

Die gleiche Umordnung kann man auch im Produkt der Erzeuger und Vernichter durchführen, da $\left[c_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} c_{\boldsymbol{k}'\uparrow}, c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right] = 0$ für $\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}'$.

(b) Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle \hat N\rangle$ der Teilchenzahl $\hat N = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma}$ und die Standardabweichung $\delta N = \sqrt{\langle \hat N^2\rangle - \langle \hat N\rangle^2}$ im BCS-Grundzustand.
Lösung:
Wir bemerken zunächst, dass der BCS-Grundzustand das Vakuum der Bogliubov Operatoren $b_{\boldsymbol{k},\sigma}$ darstellt und somit gilt:

$$b_{\boldsymbol{k},\sigma}|\Phi_{\rm BCS}\rangle = \langle \Phi_{\rm BCS}|b^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma} = 0\,, \qquad \forall\, \mathbf{k}, \sigma\,. \tag{4}$$

Diese Operatoren erhält man aus den $c_{\boldsymbol{k},\sigma}$ über eine unitäre Transformation,

$$\begin{pmatrix} c_{\boldsymbol{k},\uparrow} \\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k},\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u^*_{\boldsymbol{k}} & v_{\boldsymbol{k}} \\ -v^*_{\boldsymbol{k}} & u_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\boldsymbol{k},\uparrow} \\ b^\dagger_{-\boldsymbol{k},\downarrow} \end{pmatrix}, \tag{5}$$

wobei $u_{\boldsymbol{k}} = u_{-\boldsymbol{k}}$ und $v_{\boldsymbol{k}} = v_{-\boldsymbol{k}}$ gilt. Wir definieren die Anzahloperatoren pro Spinorientierung, $\hat{N}_\uparrow = \sum_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k},\uparrow} c_{\boldsymbol{k},\uparrow}$ und $\hat{N}_\downarrow = \sum_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k},\downarrow} c_{\boldsymbol{k},\downarrow}$. Ihre Erwartungswerte im BCS-Grundzustand sind

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | \hat{N}_\uparrow | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle &= \sum_{\boldsymbol{k}} \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | \left(u_{\boldsymbol{k}} b^\dagger_{\boldsymbol{k},\uparrow} + v^*_{\boldsymbol{k}} b_{-\boldsymbol{k},\downarrow} \right) \left(u^*_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k},\uparrow} + v_{\boldsymbol{k}} b^\dagger_{-\boldsymbol{k},\downarrow} \right) | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}} |v_{\boldsymbol{k}}|^2 \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | b_{-\boldsymbol{k},\downarrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k},\downarrow} | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle = \sum_{\boldsymbol{k}} |v_{\boldsymbol{k}}|^2 , \end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | \hat{N}_\downarrow | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle &= \sum_{\boldsymbol{k}} \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | \left(u_{\boldsymbol{k}} b^\dagger_{\boldsymbol{k},\downarrow} - v^*_{\boldsymbol{k}} b_{-\boldsymbol{k},\uparrow} \right) \left(u^*_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k},\downarrow} - v_{\boldsymbol{k}} b^\dagger_{-\boldsymbol{k},\uparrow} \right) | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}} |v_{\boldsymbol{k}}|^2 \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | b_{-\boldsymbol{k},\downarrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k},\downarrow} | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle = \sum_{\boldsymbol{k}} |v_{\boldsymbol{k}}|^2 . \end{aligned} \tag{7}$$

Der Erwartungswert des Teilchenzahloperators $\hat{N} = \hat{N}_\uparrow + \hat{N}_\downarrow$ ist somit

$$\langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | \hat{N} | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle = 2 |v_{\boldsymbol{k}}|^2 . \tag{8}$$

Zur Bestimmung der Standardabweichung im BCS-Grundzustand benötigen wir den Erwartungswert von $\hat{N}^2 = \hat{N}^2_\uparrow + \hat{N}^2_\downarrow + 2\hat{N}_\uparrow \hat{N}_\downarrow$. Dazu bestimmen wir

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | N^2_\uparrow | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle &= \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \Big\{ v^*_{\boldsymbol{k}} u^*_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}'} v_{\boldsymbol{k}'} \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | b_{-\boldsymbol{k},\downarrow} b_{\boldsymbol{k},\uparrow} b^\dagger_{\boldsymbol{k}',\uparrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k}',\downarrow} | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle \\ &\qquad + |v_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}'}|^2 \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | b_{-\boldsymbol{k},\downarrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k},\downarrow} b_{-\boldsymbol{k}',\downarrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k}',\downarrow} | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle \Big\} \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}} |u_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}}|^2 + \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} |v_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}'}|^2 = \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | N^2_\downarrow | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle , \end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | N_\uparrow N_\downarrow | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle &= \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \Big\{ - v^*_{\boldsymbol{k}} u^*_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}'} v_{\boldsymbol{k}'} \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | b_{-\boldsymbol{k},\downarrow} b_{\boldsymbol{k},\uparrow} b^\dagger_{\boldsymbol{k}',\downarrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k}',\uparrow} | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle \\ &\qquad + |v_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}'}|^2 \langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | b_{-\boldsymbol{k},\downarrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k},\downarrow} b_{-\boldsymbol{k}',\uparrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k}',\uparrow} | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle \Big\} \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}} |u_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}}|^2 + \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} |v_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}'}|^2 . \end{aligned} \tag{10}$$

Somit erhalten wir

$$\langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | \hat{N}^2 | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle = 4 \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} |v_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}'}|^2 + 4 \sum_{\boldsymbol{k}} |u_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}}|^2 . \tag{11}$$

Die Standardabweichung im BCS-Grundzustand ist somit $(\delta N)^2 = 4 \sum_{\boldsymbol{k}} |u_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}}|^2$.

(c) Berechnen Sie die Grösse $\langle \Phi_{\mathrm{BCS}} | c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} | \Phi_{\mathrm{BCS}} \rangle$ und zeichnen Sie diese Funktion in Abhängigkeit von k. Führen Sie dieselbe Rechnung für den Normalzustand (Fermi-See) $|\Phi_{FS}\rangle$ durch.

Lösung
Zunächst bestimmen wir den Erwartungswert im BCS-Grundzustand

$$\begin{aligned}\langle\Phi_{\text{BCS}}|c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}|\Phi_{\text{BCS}}\rangle =&\langle\Phi_{\text{BCS}}|(u_{\boldsymbol{k}}b^\dagger_{\boldsymbol{k},\uparrow}+v^*_{\boldsymbol{k}}b_{-\boldsymbol{k},\downarrow})(u_{\boldsymbol{k}}b^\dagger_{-\boldsymbol{k},\downarrow}-v^*_{\boldsymbol{k}}b_{\boldsymbol{k},\uparrow})|\Phi_{\text{BCS}}\rangle \qquad (12)\\ =&u_{\boldsymbol{k}}v^*_{\boldsymbol{k}}\,. \qquad (13)\end{aligned}$$

Aus der Vorlesung ist die folgende Darstellung bekannt:

$$u_{\boldsymbol{k}}=\sqrt{\frac{1}{2}\left(1+\frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{\sqrt{\xi^2_{\boldsymbol{k}}+\Delta^2_{\boldsymbol{k}}}}\right)}\,,\qquad v_{\boldsymbol{k}}=\sqrt{\frac{1}{2}\left(1-\frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{\sqrt{\xi^2_{\boldsymbol{k}}+\Delta^2_{\boldsymbol{k}}}}\right)}\,, \qquad (14)$$

wobei $\xi_{\boldsymbol{k}}=\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu$ die fermionische Einteilchenenergie und $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ die supraleitende Bandlücke ist. Dies Größen $u_{\boldsymbol{k}}$ und $v_{\boldsymbol{k}}$ sind in Abbildung skizziert. Betrachten wir nun den Erwartungswert im gefüllten Fermisee,

$$|\Phi_{\text{FS}}\rangle=\prod_{k\leq k_F,\sigma}c^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma}|0\rangle\,. \qquad (15)$$

Für diesen Zustand gilt

$$c^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma}|\Phi_{\text{FS}}\rangle=\theta(\xi_{\boldsymbol{k}})\qquad\text{und}\qquad c_{\boldsymbol{k},\sigma}|\Phi_{\text{FS}}\rangle=\theta(-\xi_{\boldsymbol{k}}) \qquad (16)$$

und somit

$$\langle\Phi_{\text{FS}}|c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}|\Phi_{\text{FS}}\rangle=\theta(-\xi_{\boldsymbol{k}})\theta(\xi_{-\boldsymbol{k}})=0 \qquad (17)$$

Im letzten Schritt haben wir die Symmetrie des Spektrums verwendet, $\xi_{-\boldsymbol{k}}=\xi_{\boldsymbol{k}}$.

(d) Finden Sie eine äquivalente Darstellung des BCS-Grundzustandes, in welcher ein Operator $\hat{\mathcal{O}}$ auf $|\Phi_{FS}\rangle$ wirkt: $|\Phi_{\text{BCS}}\rangle=\hat{\mathcal{O}}|\Phi_{FS}\rangle$.
Lösung
Wir können den BCS-Grundzustand definieren als:

$$|\Phi_{\text{BCS}}\rangle=\prod_{\boldsymbol{k}}b_{\boldsymbol{k}\uparrow}b_{-\boldsymbol{k}\downarrow}|\Phi_{FS}\rangle \qquad (18)$$

Wegen $(b_{\boldsymbol{k},\sigma})^2=0$ ist klar, dass dies der Vakuumszustand der b-Algebra ist. Wir drücken die Operatoren nun durch die Elektronoperatoren c aus:

$$\begin{aligned}|\Phi_{\text{BCS}}\rangle &=\prod_{\boldsymbol{k}}b_{\boldsymbol{k}\uparrow}b_{-\boldsymbol{k}\downarrow}|\Phi_{FS}\rangle\\ &=\prod_{\boldsymbol{k}}\left(u_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}\uparrow}-v_{\boldsymbol{k}}c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right)\left(u_{\boldsymbol{k}}c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}+v_{\boldsymbol{k}}c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\right)|\Phi_{FS}\rangle \qquad (19)\\ &=\left(\prod_{k<k_F}A_{\boldsymbol{k}}\right)\left(\prod_{k>k_F}A_{\boldsymbol{k}}\right)|\Phi_{FS}\rangle\end{aligned}$$

Im letzten Schritt haben wir den Operator

$$\begin{aligned}A_{\boldsymbol{k}} &=\left(u_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}\uparrow}-v_{\boldsymbol{k}}c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right)\left(u_{\boldsymbol{k}}c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}+v_{\boldsymbol{k}}c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\right) \qquad (20)\\ &= u^2_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}\uparrow}c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}-v_{\boldsymbol{k}}u_{\boldsymbol{k}}c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}+u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}c_{\boldsymbol{k}\uparrow}c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}-v^2_{\boldsymbol{k}}c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\end{aligned}$$

eingeführt. Da die $A_{\boldsymbol{k}}$ für unterschiedliche $\boldsymbol{k}$ vertauschen können wir das Produkt umordnen und die Wirkung von $A_{\boldsymbol{k}}$ auf den Fermisee für festes $\boldsymbol{k}$ betrachten. Dazu führen wir Operatoren $a_{\boldsymbol{k},\sigma}$ ein, deren Vakuumszustand der gefüllte Fermisee ist:

$$c_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\sigma}} = \begin{cases} a_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\sigma}}\,, & \text{für } k > k_F \\ a^\dagger_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{\sigma}}\,, & \text{für } k < k_F \end{cases} \tag{21}$$

Somit

$$A_{k<k_F} = u_{\boldsymbol{k}}^2 a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} - v_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} a_{\boldsymbol{k}\uparrow} - v_{\boldsymbol{k}}^2 a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a_{\boldsymbol{k}\uparrow}\,, \tag{22}$$

$$A_{k>k_F} = u_{\boldsymbol{k}}^2 a_{\boldsymbol{k}\uparrow} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} - v_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}\uparrow} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} - v_{\boldsymbol{k}}^2 a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\,. \tag{23}$$

Wenden wir diese operatoren auf den Vakuumszustand an erhalten wir

$$A_{k<k_F}|\Phi_{FS}\rangle = \left(u_{\boldsymbol{k}}^2 a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} - v_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}}\right)|\Phi_{FS}\rangle\,, \tag{24}$$

$$A_{k>k_F}|\Phi_{FS}\rangle = \left(u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} - v_{\boldsymbol{k}}^2 a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\right)|\Phi_{FS}\rangle\,. \tag{25}$$

Somit lautet der BCS-Grundzustand

$$\begin{aligned} |\Phi_{\text{BCS}}\rangle &= \mathcal{C} \prod_{k<k_F} \left(u_{\boldsymbol{k}} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} - v_{\boldsymbol{k}}\right) \prod_{k>k_F} \left(u_{\boldsymbol{k}} - v_{\boldsymbol{k}} a^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\right)|\Phi_{FS}\rangle \\ &= \mathcal{C} \prod_{k<k_F} \left(u_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} - v_{\boldsymbol{k}}\right) \prod_{k>k_F} \left(u_{\boldsymbol{k}} - v_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\right)|\Phi_{FS}\rangle\,. \end{aligned} \tag{26}$$

wobei $\mathcal{C} = \left(\prod_{k<k_F} u_{\boldsymbol{k}}\right)\left(\prod_{k>k_F} v_{\boldsymbol{k}}\right)$ eine Normierungskonstante bezeichnet.

(e) Berechnen Sie $\langle\Phi_{\text{BCS}}|b^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}|\Phi_{\text{BCS}}\rangle$, wobei die Operatoren $b^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} = u^*_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} - \sigma v^*_{\boldsymbol{k}} c_{-\boldsymbol{k},-\sigma}$ über die Bogoliubov-Transformation mit den gewöhnlichen Erzeugern und Vernichtern der Quasiteilchen zusammenhängen.

Lösung:

Da $\langle\Phi_{\text{BCS}}|$ der Vakuumszustand der $b_{\boldsymbol{k}\sigma}$ ist folgt sofort

$$\langle\Phi_{\text{BCS}}|b^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}|\Phi_{\text{BCS}}\rangle = 0 \tag{27}$$

(f) Berechnen Sie $\langle\Phi_{\text{BCS}}|\hat{H}_{\text{BCS}}|\Phi_{\text{BCS}}\rangle$ mit

$$\hat{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \xi_k c^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} - \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \lambda_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} c^\dagger_{\boldsymbol{k}'\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}\uparrow}.$$

Lösung:

Wir bestimmen zunächst den Erwartungswert:

$$\begin{aligned} \langle\Phi_{\text{BCS}}|c^\dagger_{\boldsymbol{k}'\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}\uparrow}|\Phi_{\text{BCS}}\rangle = &\; |v_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}'}|^2 \langle\Phi_{\text{BCS}}|b_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} b_{\boldsymbol{k}'\uparrow} b^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}|\Phi_{\text{BCS}}\rangle \\ &+ v^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}'} u^*_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \langle\Phi_{\text{BCS}}|b_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} b^\dagger_{\boldsymbol{k}'\downarrow} b_{-\boldsymbol{k}\downarrow} b^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}|\Phi_{\text{BCS}}\rangle \\ =&|v_{\boldsymbol{k}}|^2 |v_{\boldsymbol{k}'}|^2 \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} + v^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}'} u^*_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} \\ =&(1 - |u_{\boldsymbol{k}}|^2)|v_{\boldsymbol{k}'}|^2 \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} + v^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}'} u^*_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}\,. \end{aligned} \tag{28}$$

Somit finden wir

$$\langle\Phi_{\text{BCS}}|\hat{H}_{\text{BCS}}|\Phi_{\text{BCS}}\rangle = 2\sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \tilde{\xi}_{\boldsymbol{k}} |v_{\boldsymbol{k}}|^2 - \sum_{\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{k}'} \lambda_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} v^*_{\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}'} u^*_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}\,. \tag{29}$$

wobei $\tilde{\xi}_{\boldsymbol{k}} = \xi_{\boldsymbol{k}} - \lambda_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}}$. Im weiteren werden wir die Tilde der Einfachheit wegen weglassen.

2. BCS-Variationsmethode (4+3=7 Punkte)

Wir möchten nun mit Hilfe der Variationsmethode die Grundgleichungen der BCS-Theorie herleiten. Dazu minimieren wir den Erwartungswert des Hamiltonoperators aus der Aufgabe 1f bezüglich $|\Phi_{\mathrm{BCS}}\rangle$, indem wir $u_{\boldsymbol{k}}$ und $v_{\boldsymbol{k}}$ variieren:

$$\delta\langle\Phi_{\mathrm{BCS}}|\hat{H}_{\mathrm{BCS}}|\Phi_{\mathrm{BCS}}\rangle = 0.$$

(a) Parametrisieren Sie dazu $u_{\boldsymbol{k}} = \sin(\theta_{\boldsymbol{k}})$ und $v_{\boldsymbol{k}} = \cos(\theta_{\boldsymbol{k}})$. Minimieren Sie den obigen Erwartungswert, indem Sie

$$\frac{\partial}{\partial\theta_{\boldsymbol{p}}}\langle\Phi_{\mathrm{BCS}}|\hat{H}_{\mathrm{BCS}}|\Phi_{\mathrm{BCS}}\rangle = 0$$

setzen, und zeigen Sie, dass dann folgt

$$\tan(2\theta_{\boldsymbol{k}}) = -\frac{1}{2\xi_{\boldsymbol{k}}}\sum_{\boldsymbol{k}'}\lambda_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\sin(2\theta_{\boldsymbol{k}'}) = -\frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}}{\xi_{\boldsymbol{k}}},$$

wobei $\Delta_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{k}'}\lambda_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}u_{\boldsymbol{k}'}v_{\boldsymbol{k}'}$.

Lösung:

Mit dieser Parametrisierung folgt aus Gleichung (29)

$$\langle\Phi_{\mathrm{BCS}}|\hat{H}_{\mathrm{BCS}}|\Phi_{\mathrm{BCS}}\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\xi_{\boldsymbol{k}}\left[1+\cos(2\theta_{\boldsymbol{k}})\right] - \frac{1}{4}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\lambda_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\sin(2\theta_{\boldsymbol{k}})\sin(2\theta_{\boldsymbol{k}'})\,. \tag{30}$$

wobei wir die trigonometrischen Identitäten $\sin(2x) = 2\sin(x)\cos(x)$ und $\cos^2(x) = (1+\cos(2x))/2$ verwendet haben. Nun variieren wir den Erwartungswert nach $\theta_{\boldsymbol{p}}$:

$$\begin{aligned} \frac{\delta\langle\hat{H}_{\mathrm{BCS}}\rangle}{\delta\theta_{\boldsymbol{p}}} &= -2\xi_{\boldsymbol{p}}\sin(\theta_{\boldsymbol{p}}) - \sum_{\boldsymbol{k}}\lambda_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{p}}\sin(2\theta_{\boldsymbol{k}})\cos(2\theta_{\boldsymbol{p}}) \overset{!}{=} 0 \\ \Leftrightarrow \qquad \tan(2\theta_{\boldsymbol{p}}) &= -\frac{1}{2\xi_{\boldsymbol{p}}}\sum_{\boldsymbol{k}}\lambda_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{p}}\sin(2\theta_{\boldsymbol{k}}) = -\frac{\Delta_{\boldsymbol{p}}}{\xi_{\boldsymbol{p}}} \end{aligned} \tag{31}$$

(b) Zeigen Sie, dass Sie hieraus die folgende Selbstkonsistenz-Gleichung für $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ erhalten:

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}'}\lambda_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{\sqrt{\xi_{\boldsymbol{k}'}^2+\Delta_{\boldsymbol{k}'}^2}}.$$

Lösung:

Unter Verwendung der Identität $\sin(\arctan(x)) = x/\sqrt{1+x^2}$ und Gleichung (31) folgt sofort:

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{k}'}\lambda_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}u_{\boldsymbol{k}'}v_{\boldsymbol{k}'} = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}'}\lambda_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\sin(\theta_{\boldsymbol{k}'}) = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}'}\lambda_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{\sqrt{\xi_{\boldsymbol{k}'}^2+\Delta_{\boldsymbol{k}'}^2}}\,. \tag{32}$$

3. Spin-Suszeptibilität eines Supraleiters (7 Punkte)

Berechnen Sie die Pauli-Spin-Suszeptibilität eines BCS-Supraleiters als Funktion der Temperatur. Diese Rechnung kombiniert Aspekte der Berechnung der Wärmekapazität

in Supraleitern sowie der Spinsuszeptibilität des normalen Zustandes aus der Vorlesung.
Lösung:
Der gesamte Hamiltonian in Anwesenheit eines externen Magnetfelds ist $H = H_0 + H_Z$ mit dem Zeeman Term

$$H_Z = -\mu_B g \boldsymbol{B}\boldsymbol{S} = -\gamma B \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \sigma c^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma} c_{\boldsymbol{k},\sigma} \,. \tag{33}$$

Hierbei haben wir den Spin in zweiter Quantisierung $\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma} \boldsymbol{\sigma}_{\sigma,\sigma'} c_{\boldsymbol{k},\sigma'}$ benutzt, wobei $c_{\boldsymbol{k},\sigma}$ ein Elektron mit Impuls $\boldsymbol{k}$ und Spin σ vernichtet, $\gamma = \mu_B g/2$ und wir angenommen haben, dass das Magnetfeld in z-Richtung zeigt. Beachten sie, dass der Zeeman Term in der Darstellung der Bogliubov Operatoren $b_{\boldsymbol{k},\sigma}$ die gleiche Form annimmt:

$$c^\dagger_{\boldsymbol{k},\uparrow} c_{\boldsymbol{k},\uparrow} - c^\dagger_{\boldsymbol{k},\downarrow} c_{\boldsymbol{k},\downarrow} = \begin{pmatrix} c^\dagger_{\boldsymbol{k},\uparrow} & c_{-\boldsymbol{k},\downarrow} \end{pmatrix} \underbrace{U^\dagger_{\boldsymbol{k}} U_{\boldsymbol{k}}}_{=\mathbb{1}} \begin{pmatrix} c_{\boldsymbol{k},\uparrow} \\ c^\dagger_{-\boldsymbol{k},\downarrow} \end{pmatrix} - 1 = \begin{pmatrix} b^\dagger_{\boldsymbol{k},\uparrow} & b_{-\boldsymbol{k},\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{\boldsymbol{k},\uparrow} \\ b^\dagger_{-\boldsymbol{k},\downarrow} \end{pmatrix} - 1 \,. \tag{34}$$

Hierbei bezeichnet $U_{\boldsymbol{k}}$ die unitäre Transformation

$$U_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} u_{\boldsymbol{k}} & -v_{\boldsymbol{k}} \\ v^*_{\boldsymbol{k}} & u^*_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} \,. \tag{35}$$

Somit lautet der BCS Hamiltonian in einem externen Magnetfeld

$$H = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \left[E_{\boldsymbol{k}} - \gamma B \sigma\right] b^\dagger_{\boldsymbol{k},\sigma} b_{\boldsymbol{k},\sigma} \,, \tag{36}$$

wobei $E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\xi^2_{\boldsymbol{k}} + \Delta^2}$. Die Verteilungsfunktion der Bogliubov Teilchen ist $n_{\boldsymbol{k},\sigma} = n_F(E_{\boldsymbol{k}} - \gamma B\sigma)$ wobei $n_F(E) = (1 + \exp(E/k_B T))^{-1}$ die Fermi Funktion bezeichnet. Die Magnetisierung in linear response lautet

$$\begin{aligned} M =& \frac{\gamma}{V} \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} n_{\boldsymbol{k},\sigma} \sigma = \frac{\gamma}{V} \sum_{\boldsymbol{k}} \left[n_F(E_{\boldsymbol{k}} - \gamma B) - n_F(E_{\boldsymbol{k}} + \gamma B)\right] \\ \simeq& - \frac{\gamma^2 B}{V} \sum_{\boldsymbol{k}} \left.\frac{\partial n_F}{\partial E_{\boldsymbol{k}}}\right|_{B=0} \,. \end{aligned} \tag{37}$$

Die Ableitung der Fermifunktion lautet

$$\frac{\partial n_F}{\partial E_{\boldsymbol{k}}} = -\frac{1}{k_B T} \frac{e^{\frac{E_{\boldsymbol{k}}}{k_B T}}}{(1 + e^{\frac{E_{\boldsymbol{k}}}{k_B T}})^2} = -\frac{1}{4 k_B T} \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{E_{\boldsymbol{k}}}{k_B T}\right)} \,. \tag{38}$$

Somit erhalten wir für die Nullfeldsuszeptibilität

$$\begin{aligned} \chi = \left.\frac{\partial M}{\partial B}\right|_{B=0} =& \frac{\gamma^2}{4 k_B T} \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\cosh^2\left(\frac{\sqrt{\xi^2_{\boldsymbol{k}} + \Delta^2}}{k_B T}\right)} \\ =& \gamma^2 \frac{\nu_F}{2} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\xi}{2 k_B T} \frac{1}{\cosh^2\left(\sqrt{\left[\frac{\xi}{2k_B T}\right]^2 + \left[\frac{\Delta}{2k_B T}\right]^2}\right)} \\ =& \chi_{\mathrm{Pauli}} Y(T) \,. \end{aligned} \tag{39}$$

wobei ν_F die Zustandsdichte an der Fermikante und $\chi_{\text{Pauli}} = \nu_F \gamma^2/2$ ist die Suszeptibilität im Normalleiter. Die Funktion $Y(T)$ interpoliert zwischen der verschwindenden paramagnetischen Suszeptibilität im Supraleiter ($T \ll T_c$) und der Pauli Suszeptibilität im Normalleiter ($T \gg T_c$). Sie ist gegeben durch

$$Y(T) = \int_0^\infty \mathrm{d}x \, \frac{1}{\cosh^2\left(\sqrt{x^2 + \left[\frac{\Delta}{2k_B T}\right]^2}\right)} \,. \tag{40}$$