

Moderne Theoretische Physik I SS 2021

Prof. Dr. Jörg Schmalian
Vanessa Gall, Dr. Roland WillaBlatt 10
Abgabe 02.07.2021

1. Stromdichte

Ohne Spin ist die Stromdichte eines geladenen Teilchens in einem elektromagnetischen Feld gegeben durch

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi] - \frac{e}{mc}\mathbf{A}|\psi|^2. \quad (1)$$

Gleichzeitig stellt $\rho = |\psi|^2$ die Teilchendichte dar.

- Zeigen Sie, dass damit die Kontinuitätsgleichung $\partial_t\rho + \nabla\mathbf{j} = 0$ erfüllt ist. Verwenden Sie hierzu die Schrödingergleichung $i\hbar\partial_t\psi = \{[-i\hbar\nabla - (e/c)\mathbf{A}]^2/2m + e\varphi\}\psi$ und ihre komplex Konjugierte um die Zeitableitungen auszudrücken.
- Beweisen Sie, dass die Stromdichte eichinvariant ist.

Lösungsskizze:

- Wir setzen ein

$$\partial_t\rho + \nabla\mathbf{j} = (\partial_t\psi^*)\psi + \psi^*(\partial_t\psi) - \frac{i\hbar}{2m}[\psi^*(\Delta\psi) - (\Delta\psi^*)\psi] \quad (2)$$

$$- \frac{e}{mc}\{(\nabla\mathbf{A})|\psi|^2 + \mathbf{A} \cdot [(\nabla\psi^*)\psi + \psi^*(\nabla\psi)]\}$$

$$= [(\partial_t\psi^*) + \frac{i\hbar}{2m}(\Delta\psi^*) - \frac{e}{2mc}(\nabla\mathbf{A})\psi^* - \frac{e}{mc}\mathbf{A} \cdot (\nabla\psi^*)]\psi \quad (3)$$

$$+ \psi^*[(\partial_t\psi) - \frac{i\hbar}{2m}(\Delta\psi) - \frac{e}{2mc}(\nabla\mathbf{A})\psi - \frac{e}{mc}\mathbf{A} \cdot (\nabla\psi)]$$

Verwendet man nun die Schrödingergleichung $i\hbar\partial_t\psi = [-i\hbar\nabla - (e/c)\mathbf{A}]^2\psi/2m + e\varphi$ und entsprechend die komplex konjugierte dieser Gleichung so ergibt sich

$$\begin{aligned} \partial_t\rho + \nabla\mathbf{j} &= \frac{i}{\hbar}\left[\left(\frac{1}{2m} - \frac{e^2}{m^2c^2}\right)A^2\psi^* + e\varphi\psi^*\right]\psi \\ &\quad - \frac{i}{\hbar}\psi^*\left[\left(\frac{1}{2m} - \frac{e^2}{m^2c^2}\right)A^2\psi + e\varphi\psi\right] = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

- In der Vorlesung wurde gezeigt, dass die quantenmechanische Beschreibung (Schrödingergleichung) invariant bleibt unter einer Eichtransformation

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f \quad (5)$$

$$\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - c^{-1}\partial_t f \quad (6)$$

$$\psi \rightarrow \psi' = \psi e^{i(e/\hbar c)f}. \quad (7)$$

Durch Einsetzen in die Stromdichte erhält man, dass auch diese invariant ist

$$\mathbf{j}' = -\frac{i\hbar}{2m}[\psi'^*(\nabla\psi') - (\nabla\psi'^*)\psi'] - \frac{e}{mc}\mathbf{A}'|\psi'|^2 \quad (8)$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*[(\nabla\psi) + \psi(\frac{ie}{\hbar c}\nabla f)] - [(\nabla\psi^*) + \psi^*(\frac{-ie}{\hbar c}\nabla f)]\psi] - \frac{e}{mc}(\mathbf{A} + \nabla f)|\psi|^2 \quad (9)$$

$$= \mathbf{j}. \quad (10)$$

2. Zu Landau Niveaus

Es sei ein Teilchen in einem externen Magnetfeld $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, mit dem Hamilton-Operator $\hat{H} = [\mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A}]^2/2m$, wobei das Vektorpotential \mathbf{A} an \mathbf{B} geknüpft ist via $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$.

- Verifizieren Sie, dass $\mathbf{A} = -yB\mathbf{e}_x$ die obige Bedingung erfüllt und zeigen Sie, dass damit $\hat{x}_0 \equiv \hat{x} + c\hat{p}_y/eB$ und $\hat{y}_0 \equiv -c\hat{p}_x/eB$ mit dem Hamiltonoperator kommutieren.
- Bestimmen Sie ein Vektorpotential mit $A_x = A_z = 0$, welches ebensogut das Magnetfeld wiedergibt.
- Lösen sie das Landau Problem (analog zur Vorlesung) für die Eichung in b): Konkret, geben Sie die Wellenfunktionen der Landau Niveaus an und vergleichen Sie die Eigenenergien mit denjenigen aus der Vorlesung.
- Finden Sie eine Eichung in der das Vektorpotential offensichtlich die Rotations-symmetrie um die z -Achse respektiert.

Lösungsskizze:

- Es gilt $\nabla \times \mathbf{A} = (0, 0, B)$. Ausserdem berechnen wir

$$[\hat{x}_0, \hat{H}] = \frac{1}{2m}[(\hat{x} + c\hat{p}_y/eB), \{\mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A}\}^2] \quad (11)$$

$$= \frac{1}{2m}[(\hat{x} + c\hat{p}_y/eB), \{\hat{p}_x - (e/c)A_x\}^2] = 0 \quad (12)$$

hier haben wir die Eigenschaft $[\hat{A}, \hat{B}^2] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}]$ verwendet und gezeigt, dass bereits $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ gilt für $\hat{A} = \hat{x} + c\hat{p}_y/eB$ und $\hat{B} = \hat{p}_x - (e/c)(-yB)$. Der Operator $\hat{y}_0 \propto \hat{p}_x$ kommutiert trivial mit \hat{H} weil nichts in \hat{H} explizit von x abhängt.

- Es ist $\mathbf{A} = xB\mathbf{e}_y$.
- Die Herleitung erfolgt analog. Es genügt eine Substitution $x \rightarrow y$ und $y \rightarrow -x$ um die Lösung direkt zu erhalten. Es gilt

$$\psi_{n,k_y,k_z} = e^{i(k_y y + k_z z)} u_n(x) \quad (13)$$

und

$$u_n(x) = C_n H_n[\sqrt{m\omega_L/\hbar}(x + x_0)] \exp[-(m\omega_L/2\hbar)(x + x_0)^2] \quad (14)$$

mit den Hermite-Polynomen H_n , Normierungskonstanten C_n , der Larmor-Frequenz $\omega_L = eB/mc$ und $x_0 = c\hbar k_y/eB$. Die zugehörigen Eigenenergien $E_{n,k_y,k_z} = (\hbar k_z)^2/2m + \omega_L(n + 1/2)$ sind identisch zu denjenigen in der anderen Eichung (vgl. Vorlesung).

- Die Eichung $\hat{A} = -(\mathbf{r} \times \mathbf{B})/2 = (-y, x, 0)B/2$ spiegelt die Rotationssymmetrie des Systems um die z -Achse wieder und ergibt sich aus dem Mittel der beiden oben diskutierten Eichungen.

3. Teilchen-Loch-Zustände (und Supraleitung)

In dieser Aufgabe betrachten wir eine spezielle Erweiterung der bereits bekannten Schrödingergleichung, bei der der Hamiltonoperator zusätzlich eine Matrixstruktur und die Wellenfunktionen somit eine Vektorstruktur besitzt. Dies tritt unter Anderem ein, wenn zusätzlich zu den Teilchen- auch Lochlösungen zulässig sind. Speziell betrachten wir das Problem

$$\begin{pmatrix} \hat{H} & \Delta \\ \Delta^* & -\hat{H} \end{pmatrix} \psi = E\psi \quad (15)$$

mit $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 - \mu$, $\Delta = \text{const.}$ und $\psi = [u(x), v(x)]^T$. Im Vektorraum von ψ stellt $(1, 0)^T$ den Teilchenkanal und $(0, 1)^T$ den Lochkanal dar. Der Parameter $\mu > 0$ ist eine Konstante, die chemisches Potential genannt wird und die Einheiten einer Energie besitzt. Dieses Modell wird verwendet, um Heterostrukturen zu beschreiben, die sowohl aus normalen Metallen und Halbleitern als auch aus Supraleitern besteht.

- Betrachten Sie den metallischen Fall $\Delta = 0$ und bestimmen Sie die Lösungen (Eigenvektoren, Zustände und Energien) der stationären Schrödingergleichung. Nutzen Sie dazu einen Ebene-Wellen-Ansatz für u und v . Geben Sie explizit die Energie-Impuls-Beziehungen für alle (Eigen-)Lösungen an.
- Zeigen Sie, dass sich die Lösungen bei $E=0$ kreuzen, bestimmen Sie den zugehörigen (Fermi-)Wellenvektor k_F und skizzieren Sie die Energie-Impuls Beziehung.
- Betrachten Sie nun einen Supraleiter mit $\Delta > 0$ und reell. Finden Sie auch hier die Eigenenergien (als Herausforderung auch die Eigenzustände). Zeigen Sie dass Energie-Impuls-Beziehung die Form

$$E_{\pm}(k) = \pm \sqrt{[\hbar^2 k^2 / 2m - \mu]^2 + \Delta^2} \quad (16)$$

annimmt und skizzieren Sie diese. Diskutieren Sie was in der Nähe von k_F passiert.

- Ähnlich wie bei der Entartung von Zuständen in diskreten Spektren (z.B. Wasserstoffatom, harmonischer Oszillator) sind auch hier nicht alle Energien mit gleich vielen Zuständen versehen. Die Zustandsdichte wird definiert als

$$D(E, \Delta) = \sum_j \left| \frac{\partial k_j(E)}{\partial E} \right| \quad (17)$$

wobei die Summe über die Indizes aller Lösungen k_j zu einer Energie E läuft.

Berechnen Sie $D(E) \equiv D(E, 0)$ [aus a) und b)] und $D(E, \Delta)$ [aus c)] und vereinfachen Sie den letzteren Ausdruck für den Fall $\mu^2 \gg E^2 - \Delta^2$.

Lösungsskizze:

- Für $\Delta = 0$ ist die Matrixgleichung diagonal und es existieren zwei triviale Eigenzustände

$$\psi_t = \begin{pmatrix} u \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \psi_\ell = \begin{pmatrix} 0 \\ v \end{pmatrix} \quad (18)$$

wobei jeder Fall mit dem Ansatz $u(x) = u_0 e^{ikx}$, $v(x) = v_0 e^{ikx}$ gelöst werden kann. Es gilt

$$\frac{\hbar^2 k_t^2}{2m} - \mu = E \quad \text{und} \quad -\frac{\hbar^2 k_\ell^2}{2m} + \mu = E \quad (19)$$

und damit die Energie-Impuls Beziehungen $E_t(k) = \hbar^2 k^2 / 2m - \mu$, $E_\ell(k) = -\hbar^2 k^2 / 2m + \mu$ oder die Impuls-Energie Beziehungen

$$k_t(E) = \pm \sqrt{(2m/\hbar^2)(E + \mu)} \quad \text{und} \quad k_\ell(E) = \pm \sqrt{(2m/\hbar^2)(-\mu - E)} \quad (20)$$

b) Die Dispersionsrelation ist in 1 abgebildet. Für $E = 0$ erhalten wir

$$k_t(0) = \pm \sqrt{(2m/\hbar^2)(\mu)} \quad \text{und} \quad k_\ell(0) = \pm \sqrt{(2m/\hbar^2)(\mu)}. \quad (21)$$

Es gibt also Schnittpunkte bei $k = \pm \sqrt{(2m/\hbar^2)(\mu)}$. Dieser Wert wird als Fermi-Wellenvektor k_F bezeichnet.

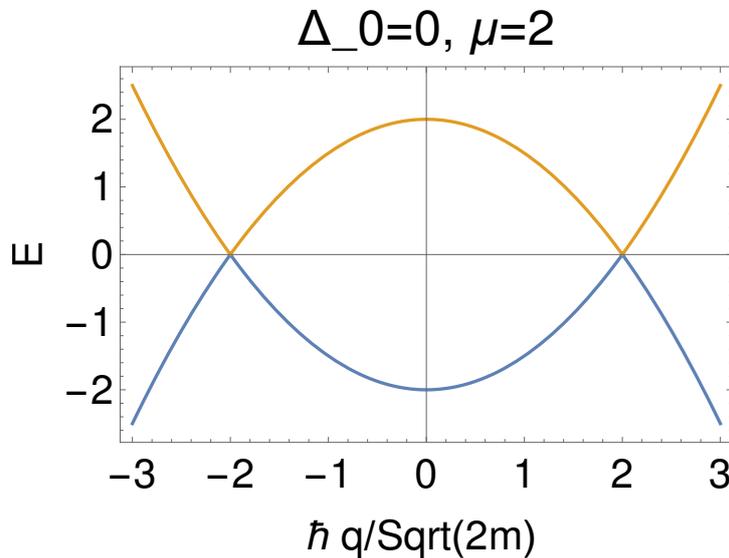


Abbildung 1: Dispersionsrelationen

c) Für $\Delta \neq 0$ nutzen wir wieder denselben Ansatz $u(x) = u_0 e^{iqx}$, $v(x) = v_0 e^{iqx}$. Damit reduziert sich die Differentialgleichung zu einer Matrixgleichung der Art

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m} q^2 - \mu & \Delta \\ \Delta & -\frac{\hbar^2}{2m} q^2 + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} \quad (22)$$

Die Eigenwerte dieser Gleichung sind

$$E_{\pm}(q) = \pm \sqrt{\left[\frac{\hbar^2 q^2}{2m} - \mu \right]^2 + \Delta^2} \quad (23)$$

Wir erkennen sofort, dass diese Lösung für $\Delta \rightarrow 0$ wieder auf die obigen Ausdrücke für E_t und E_ℓ führt. In der Nähe des Fermi-Impulses hat sich jedoch für endliches Δ eine Lücke geöffnet, nämlich $E_+(k_F) - E_-(k_F) = 2\Delta$. Für Energien in dieser Lücke gibt es keine Zustände. Ausserhalb der Lücke gibt es bis zu 4 Impulse zu jeder Energie, nämlich

$$q_{\sigma_1, \sigma_2} = \sigma_2 \sqrt{(2m/\hbar^2)[\mu + \sigma_1(E^2 - \Delta^2)^{1/2}]} \quad (24)$$

wobei $\sigma_j \in \{\pm 1\}$. Für $E^2 - \Delta^2 > \mu^2$ verschwindet ein Paar der Lösungen ($\sigma_1 = -1$ wird imaginär). Die Eigenvektoren sind

$$\begin{pmatrix} u_- \\ v_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2m\mu - \hbar^2 k^2}{2m\Delta} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4m^2 \Delta^2}{(2m\mu - \hbar^2 k^2)^2}}\right) \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (25)$$

$$\begin{pmatrix} u_+ \\ v_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2m\mu - \hbar^2 k^2}{2m\Delta} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4m^2 \Delta^2}{(2m\mu - \hbar^2 k^2)^2}}\right) \\ 1 \end{pmatrix} \quad (26)$$

Die Dispersionsrelation ist in 2 abgebildet. In der Nähe von k_F öffnet sich eine

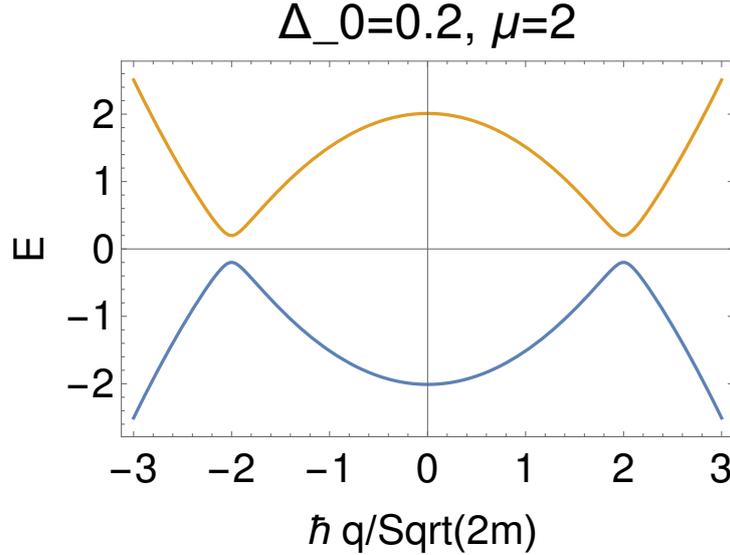


Abbildung 2: Dispersionsrelationen

Bandlücke im Energiespektrum. Diese hat die Größe

$$E_+(k_F) - E_-(k_F) = 2\Delta. \quad (27)$$

- d) Betrachten wir zunächst den Fall $\Delta = 0$. Die Zustandsdichte (Dichte der Energiezustände im q -Raum) jedes Lösungszweigs ergibt sich aus

$$\left| \frac{\partial q_t}{\partial E} \right| = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m/\hbar^2}{\mu + E}} \quad \text{und} \quad \left| \frac{\partial q_\ell}{\partial E} \right| = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m/\hbar^2}{\mu - E}}. \quad (28)$$

Die gesamte Zustandsdichte $D(E)$ ist dann die Summe der vier Beiträge (je zwei für q_t und q_ℓ), also

$$D(E) = \sqrt{\frac{2m/\hbar^2}{\mu + E}} + \sqrt{\frac{2m/\hbar^2}{\mu - E}}. \quad (29)$$

und es gilt $D(0) = 4m/\hbar^2 k_F$.

Die Zustandsdichte für $|E| > \Delta$ ergibt sich aus

$$D(E, \Delta) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2 = \pm 1} \left| \frac{\partial q_{\sigma_1, \sigma_2}}{\partial E} \right| = \left(\sqrt{\frac{2m/\hbar^2}{\mu + \sqrt{E^2 - \Delta^2}}} + \sqrt{\frac{2m/\hbar^2}{\mu - \sqrt{E^2 - \Delta^2}}} \right) \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \quad (30)$$

Der Ausdruck vereinfacht sich im Fall $\mu \gg \Delta$ in der Nähe der Energielücke zu

$$D(E, \Delta) \approx D(0) \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}}, \quad (31)$$

mit einer charakteristischen Singularität $(E \pm \Delta)^{-1/2}$ an der Bandlücke.

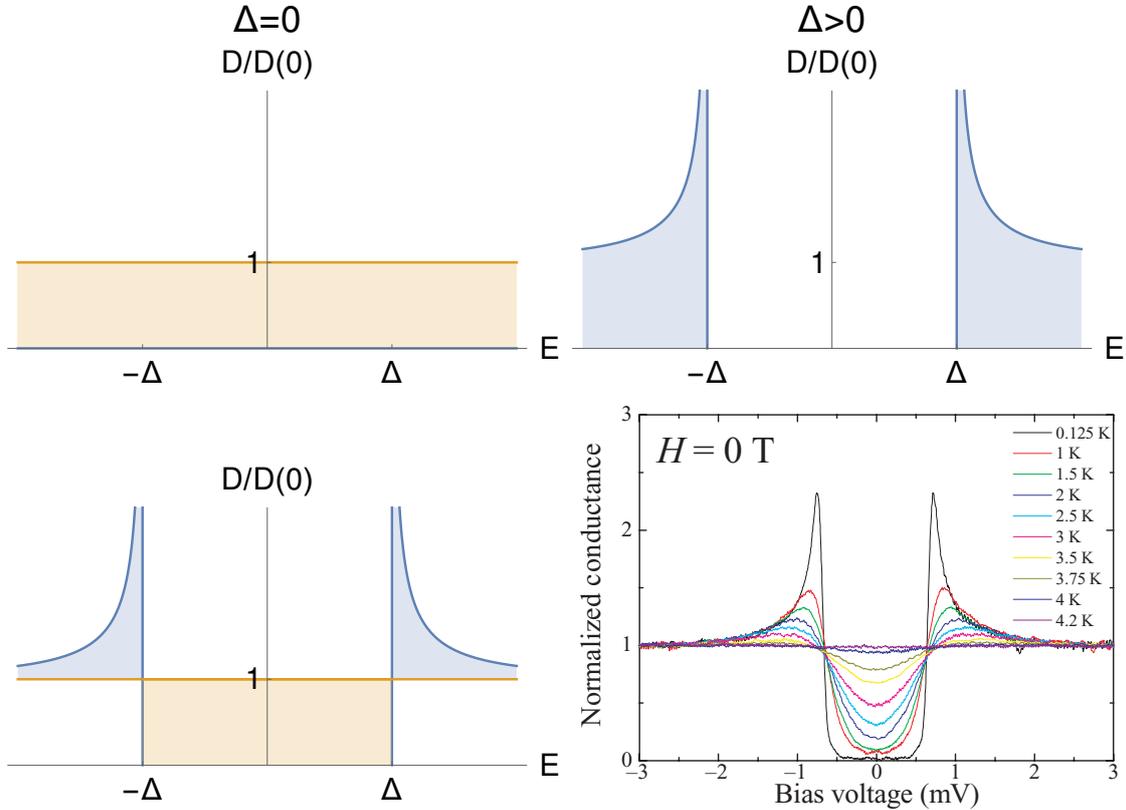


Abbildung 3: Zustandsdichte für niedrige Energien. Oben links: im normalen Metall, die Zustandsdichte ist konstant. Oben rechts: im Supraleiter, es gibt keine Zustände innerhalb der Bandlücke. Unten links: Vergleich, alle Zustände des normalen Metalls, die in der Bandlücke des Supraleiters liegen (orange) werden umverteilt in neue Zustände (blau). Die Gesamtanzahl der Zustände ändert sich also nicht. Unten rechts: Bei der sogenannten Rastertunnelspektroskopie wird eine metallische Spitze nahe an eine Probenoberfläche gebracht und der (Tunnel-)Leitwert dI/dV (normalized conductance) gemessen als Funktion der Spannung (bias voltage) zwischen der Probe und der Spitze. Dabei ist dI/dV proportional zur Zustandsdichte ist. Hier ist der normierte Leitwert von Wolfram (W) für verschiedene Temperaturen gegeben wobei das Material unterhalb von 4.2K supraleitend wird, d.h. die supraleitende Lücke geht auf. Bei 125mK gleicht die Zustandsdichte derjenigen aus Gl. (31). Quelle: Guillaumon *et al.*, *Nanoscale superconducting properties of amorphous W-based deposits grown with a focused-ion-beam* New J. Phys. **10**, 093005 (2008), [<https://doi.org/10.1088/1367-2630/10/9/093005>]