Übungen zur Vorlesung Theorie 5 (Quantenmechanik II)

Blatt 8

Fragen zur Vorlesung:

39. Erläutern Sie das Konzept der Fermiflüssigkeit.
40. Welche Form hat der Zweiteilchenoperator der Coulomb-Wechselwirkung im Impulsraum?
41. Welcher Parameter muss klein sein, damit man eine Störungsentwicklung in der Coulomb-Wechselwirkung machen darf? Warum?
42. Erläutern Sie die Grundidee der Hartree-Fock-Näherung.

Aufgaben (Abgabe bis 13:00 am 6.1.2016 im Kasten 35)

Aufgabe 15) Integrale zum Elektronengas II (4 Punkte)

Beweisen Sie folgende in der Vorlesung verwendete Relation:

$$\int_{q < k_F} \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\vec{k} - \vec{q}|^2} = \frac{k_F}{2\pi^2} F(k/k_F) \text{ mit } F(x) = \frac{1}{2} + \frac{1-x^2}{4x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|$$

Aufgabe 16) Hartree-Fock-Näherung (8 Punkte)

Wenden Sie die Hartree-Fock-Gleichungen aus Abschnitt 3.4.3 der Vorlesung auf "freie" Elektronen in einem homogenen positiven Ionen Hintergrund (Jellium) an. Das gesamte System sei elektroneutral.

- a) Zeigen Sie, dass die Hartree-Fock Gleichungen durch ebene Wellen gelöst werden.
- b) Zeigen Sie, dass sich der Hartree-Term gegen die Coulomb-Anziehung durch den positiven Ionen Hintergrund kompensiert. Berechnen Sie die Ionisierungsenergien $\epsilon(\vec{k})$. Sie erhalten

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{(\hbar\vec{k})^2}{2m} - \frac{1}{V} \sum_{\vec{q} \neq \vec{k}} \frac{4\pi e^2}{|\vec{k} - \vec{q}|^2} \langle n_{\vec{q}} \rangle. \quad (1)$$

mit $\langle n_{\vec{q}} \rangle = \Theta(k_F - q)$.

- c) Nähern Sie die Summe über $\vec{q}$ durch ein Integral an gemäß $\sum_{\vec{q}} f(\vec{q}) \approx \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3q f(\vec{q})$ und berechnen Sie damit $\epsilon(\vec{k})$ als Funktion der Fermi-Wellenzahl k_F . Benutzen Sie dazu Aufgabe 14) Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem Ausdruck aus Kapitel 3.4.2.4 der Vorlesung.

Aufgabe Z6) Pfadintegralzugang zur BCS-Theorie für Supraleiter

(12 Sonderpunkte oder auch mehr, je nach Umfang der Bearbeitung)

Das Pfadintegral für die grosskanonische Zustandssumme eines Systems von nichtrelativistischen Elektronen lautet (mit $\hbar = 1$)

$$\mathcal{Z} = \int d[\psi] d[\psi^*] \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau L \right\}, \quad (2)$$

mit der Lagrange-Funktion

$$L = \int d\mathbf{r} \sum_\sigma \psi_\sigma^+ \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\nabla^2}{2M} - \mu \right) \psi_\sigma + L_{\text{pot}}.$$

Hier summiert $\int d[\psi] d[\psi^*] \dots$ über geschlossene Pfade von Grassmann-Feldern $\psi(\mathbf{r}, \tau)$ mit antiperiodischen Randbedingungen: $\psi(\mathbf{r}, \beta) = -\psi(\mathbf{r}, 0)$.

In der BCS Theorie nimmt man für die potentielle Energie eine vereinfachte, abgespeckte Wechselwirkung an

$$L_{\text{pot}} = \bar{v} \int d^3r \psi_\uparrow^+(\mathbf{r}) \psi_\downarrow^+(\mathbf{r}) \psi_\downarrow(\mathbf{r}) \psi_\uparrow(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Hierbei ist $\bar{v} > 0$ und entspricht einer attraktiven Kontaktwechselwirkung, die durch Phononen vermittelt wird. Wir betrachten speziell den Fall kleiner Temperaturen bzw. $\beta \rightarrow \infty$.

(a) Zeigen Sie, daß sich dieses Pfadintegral umschreiben lässt in

$$\mathcal{Z} \sim \int d[\psi] d[\psi^*] d[\Delta] d[\Delta^*] \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3r \left[(\psi_\uparrow^+ \ \psi_\downarrow) \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\nabla^2}{2M} - \mu & \Delta \\ \Delta^* & \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2M} + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow^+ \end{pmatrix} - \frac{1}{\bar{v}} |\Delta|^2 \right] \right\}, \quad (4)$$

wobei $\Delta(\mathbf{r}, \tau)$ und $\Delta^*(\mathbf{r}, \tau)$ komplexe skalare Hilfsfelder sind. (Hier steht $\int d[\Delta] d[\Delta^*]$ einfach für die Integration über Real- und Imaginärteil von Δ .)

Die Fermionenfelder ψ , ψ^+ kommen nun nur noch quadratisch vor und können im Prinzip ausintegriert werden. Man erhält ein neues Pfadintegral

$$\mathcal{Z} \sim \int d[\Delta] d[\Delta^*] \exp\{-S[\Delta, \Delta^*]\} \quad \text{mit} \quad S = S_F - \frac{1}{\bar{v}} \int_0^\beta d\tau \int d^3r |\Delta|^2. \quad (5)$$

Der Fermionenanteil der Wirkung ist hier noch über eine Funktionaldeterminante gegeben,

$$S_F = \ln \det \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\nabla^2}{2M} - \mu & \Delta \\ \Delta^* & \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\nabla^2}{2M} + \mu \end{pmatrix}. \quad (6)$$

(b) Um weiterzukommen, machen wir eine sogenannte *Sattelpunktsnäherung*: Wir nehmen an, daß das Pfadintegral völlig von dem Minimum der Wirkung dominiert wird,

$$\int d[\Delta] d[\Delta^*] \exp\{-S[\Delta, \Delta^*]\} \approx \exp\{-\min_{\Delta, \Delta^*} S[\Delta, \Delta^*]\}. \quad (7)$$

Es ist anzunehmen, daß die minimierenden Felder Δ , Δ^* konstant sind. Dann kann die Wirkung S_F (5) explizit berechnet werden. Dazu wechselt man vom Ortsraum $(\mathbf{r}, \tau)$ in den Fourierraum $(\mathbf{k}, \omega)$ und erhält aus (4) und (5)

$$\exp(-S_F) = \int d[\psi]d[\psi^*] \exp \left\{ - \sum_{\mathbf{k}, \omega} (\psi_{\uparrow}^{\dagger} \ \psi_{\downarrow}) \begin{pmatrix} i\omega + \frac{k^2}{2M} - \mu & \Delta \\ \Delta^* & i\omega - \frac{k^2}{2M} + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} \right\},$$

wobei das Pfadintegral hier über $\psi(\mathbf{k}, \omega)$ anstelle von $\psi(\mathbf{r}, \tau)$ läuft. Dieses Integral kann mit Hilfe von Gl. (1) aus Aufgabe Z5 ausgewertet werden.

Leiten Sie einen Ausdruck für S_F her. Machen Sie die übliche Ersetzung $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow V \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$ und $\sum_{\omega} \rightarrow \beta \int \frac{d\omega}{2\pi}$ und zeigen Sie

$$\mathcal{Z} \sim \exp \left\{ -V\beta \min_{\Delta, \Delta^*} \left[\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \ln(\omega^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2) - \frac{|\Delta|^2}{\bar{v}} \right] \right\} \quad (8)$$

mit $\epsilon_{\mathbf{k}} = k^2/2M - \mu$.

- (c) Finden Sie nun den Parameter Δ , der die Wirkung minimiert. Dazu müssen Sie im Integral $\int d^3k$ einen oberen Cutoff einführen. Da die Wechselwirkung $\bar{v}$ durch Phononen vermittelt wird, macht man den Ansatz, dass dieser Cutoff durch die Debye-Frequenz des Kristalls gegeben ist. Machen Sie also die Näherung $\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \rightarrow N(0) \int_{-\epsilon_D/2}^{\epsilon_D/2} d\epsilon$, wobei ϵ_D die Debye-Energie des Kristalls ist, und $N(0)$ die Zustandsdichte an der Fermikante.

Für $\bar{v}N(0) \gg 1$ erhalten Sie das aus der BCS-Theorie bekannte Ergebnis

$$|\Delta| = \epsilon_D \exp\left(-\frac{1}{N(0)\bar{v}}\right). \quad (9)$$

- (d) Warum würde man $|\Delta|$ hier mit einer Energielücke identifizieren? (Wie kann man Δ in Gleichung (8) in eine effektive Einteilchenwechselwirkung ϵ_k^{eff} integrieren?)

Anmerkung: Aus der Sicht der statistischen Physik sind Sattelpunktsnäherungen Mean-field Näherungen. Die BCS-Theorie ist also eine Mean-field Theorie.