



**Physik der  
Kondensierten Materie 2**

**Rudolf Gross**

**SS 2021**

**Teil 30**

**Vorlesungsstunde: 07.06.2021-2**

## • Attraktive Elektron-Elektron-Wechselwirkung

– attraktive WW über Gitterschwingungen (Austausch virtueller Phononen: Fröhlich, Bardeen)

– Streumatrixelement: (i) reine Coulomb-WW:  $V(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{\epsilon_0 q^2}$  (immer positiv  $\rightarrow$  rein repulsive WW)

$$(ii) \text{ abgeschirmte Coulomb-WW: } V(\mathbf{q}, \omega) = \frac{e^2}{\epsilon(\mathbf{q}, \omega)\epsilon_0 q^2} = \left( \frac{e^2}{k_s^2 + q^2} \right) \left( 1 + \frac{\omega^2}{\omega^2 - \tilde{\Omega}^2(\mathbf{q})} \right)$$

Thomas-Fermi-Wellenvektor

$q$ -abh. Plasmafrequenz der abgeschirmten Ionen in Metall

für kleine Energiedifferenz  $E_k - E_{k'} = \hbar\omega < \hbar\tilde{\Omega}_p(\mathbf{q})$  der beteiligten Elektronen:

$\rightarrow$  Nenner wird negativ  $\rightarrow$  negatives Matrixelement  $\rightarrow$  attraktive WW

$\rightarrow$  Abschneidefrequenz:  $\omega = \tilde{\Omega}_p \approx \omega_D$  (Debye-Frequenz)

## • Cooper-Paare

– **Gedankenexperiment:**

wir addieren 2 zusätzliche Elektronen zu Fermi-Gas bei  $T = 0$

– Elektronen können durch Austausch von Phononen mit Wellenzahl  $q$  wechselwirken

– Streuung: Elektron 1:  $\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}$

Elektron 2:  $\mathbf{k}_2 \rightarrow \mathbf{k}'_2 = \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}$

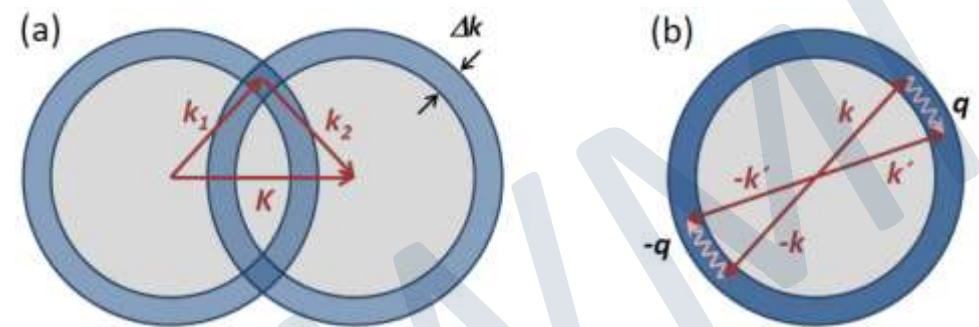
Gesamtimpuls  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2 = \mathbf{K}'$

– nur Zustände mit  $E > E_F$  sind zugänglich, da  $\omega_{ph} < \omega_D$  spielt sich WW in Intervall

$[E_F, E_F + \hbar\omega_D]$  bzw.  $k_F \leq k \leq k_F + \frac{m\omega_D}{\hbar k_F} = k_F + \Delta k$  ab

– wegen Erhaltung des Gesamtimpulses müssen Wellenvektoren in Schnittfläche von zwei Kreisscheiben der Dicke  $\Delta k$  liegen  $\rightarrow$  maximale Schnittfläche/Phasenraum für  $\mathbf{K} = \mathbf{0}$  bzw.  $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$

$\rightarrow$  Cooper-Paare  $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$



## • Cooper-Paar-Wechselwirkung

– Ansatz: Paarwellenfunktion = Überlagerung aus Produktfunktionen  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{k=k_F}^{k_F+\Delta k} a_k \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$

– Schrödinger-Gleichung:  $-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$

– Vereinfachung:  $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0 & \text{für } k' > k_F, k < k_F + \Delta k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{mit } \Delta k = \frac{m\omega_D}{\hbar k_F}$

– Gesamtenergie:  $E \simeq 2E_F - 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{4}{V_0 D(E_F)}\right)$  für schwache WW ( $V_0 D(E_F) \ll 1$ )

← Energieabsenkung proportional zu Phononenenergie  $\hbar\omega_D$

– Unschärfe-Relation:  $\Delta k \Delta x \geq 1 \rightarrow \Delta x \leq \frac{1}{\Delta k} = \frac{v_F}{\omega_D} \simeq 100 \text{ nm}$

## • Symmetrie der Paar-Wellenfunktion

– Fermionen  $\rightarrow$  Gesamtwellenfunktion muss antisymmetrisch sein

Singulett-Paarung	$S = 0$	$L = 0, 2, 4, \dots$
Triplett-Paarung	$S = 1$	$L = 1, 3, 5, \dots$

$$S = \begin{cases} 0 & m_s = 0 & \chi^a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) & \text{Singulett-Paarung} \\ 1 & m_s = \begin{cases} -1 & \chi^s = \downarrow\downarrow \\ 0 & \chi^s = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ +1 & \chi^s = \uparrow\uparrow \end{cases} & & \text{Triplett-Paarung} \end{cases}$$

– **Beispiele:** metallische SL:  $S = 0, L = 0$ , Hochtemperatur-SL:  $S = 0, L = 2$ , suprafluides  ${}^3\text{He}$ :  $S = 1, L = 1$



# Kapitel 13

## Supraleitung



www

# 13.5.2 BCS-Grundzustand

Wie sieht der Grundzustand des gesamten Elektronensystems bei Anwesenheit einer attraktiven WW aus?

- **Erwartung:**
  - Paar-Wechselwirkungsmechanismus geht so lange weiter, bis sich der Fermi-See signifikant geändert hat
  - Paarungsmechanismus stoppt, sobald die gewonnene Paarungsenergie gegen Null geht
  - detaillierte theoretische Beschreibung ist schwierig → Diskussion von Grundlagen

WMI

# 13.5.2 BCS-Grundzustand

Formalismus der 2. Quantisierung - Dirac, Fock, Jordan et al., ab 1927 (1)

– Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren:

- fermionischer Erzeugungsoperator:  $c_{k,\sigma}^\dagger$
- fermionischer Vernichtungsoperator  $c_{k,\sigma}$

– Antikommutationsrelationen:

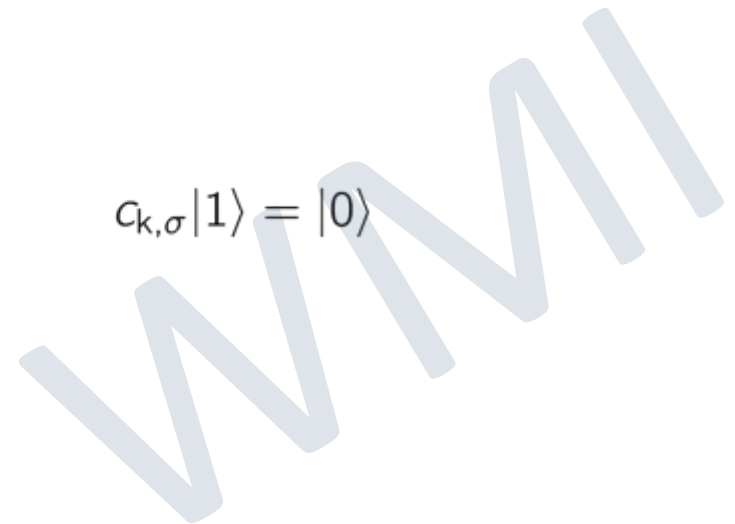
$$\{c_{k,\sigma}, c_{k',\sigma'}^\dagger\} \equiv c_{k,\sigma}c_{k',\sigma'}^\dagger + c_{k',\sigma'}^\dagger c_{k,\sigma} = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'}$$

$$\{c_{k,\sigma}, c_{k',\sigma'}\} = \{c_{k,\sigma}^\dagger, c_{k',\sigma'}^\dagger\} = 0$$

ferner gilt:  $c_{k,\sigma}^\dagger|0\rangle = |1\rangle, \quad c_{k,\sigma}|0\rangle = 0, \quad c_{k,\sigma}^\dagger|1\rangle = 0, \quad c_{k,\sigma}|1\rangle = |0\rangle$

– Teilchenzahloperator:  $c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} = n_{k,\sigma} \quad c_{k,\sigma} c_{k,\sigma}^\dagger = 1 - n_{k,\sigma}$

– Pauli-Prinzip:  $c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}^\dagger = 0 \quad c_{k,\sigma} c_{k,\sigma} = 0$

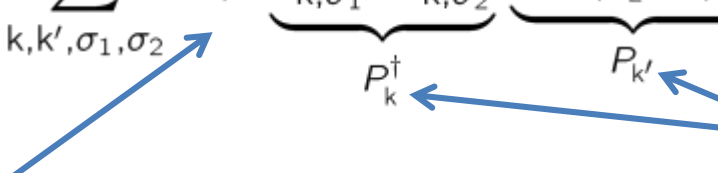


# 13.5.2 BCS-Grundzustand

## Formalismus der 2. Quantisierung (2)

- Operator zur Beschreibung der Streuung von Zustand  $(\mathbf{k}'\sigma_1, -\mathbf{k}'\sigma_2)$  in Zustand  $(\mathbf{k}\sigma_1, -\mathbf{k}\sigma_2)$

$$\sum_{k,k',\sigma_1,\sigma_2} V_{k,k'} \underbrace{c_{k,\sigma_1}^\dagger c_{-k,\sigma_2}^\dagger}_{P_k^\dagger} \underbrace{c_{-k',\sigma_2} c_{k',\sigma_1}}_{P_{k'}} \quad \text{Paar-Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren}$$



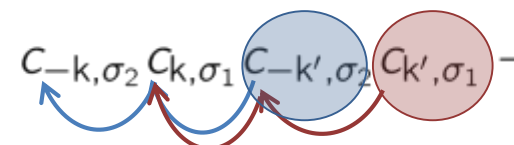
Wechselwirkungspotenzial  $V_{k,k'} = V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = V(\mathbf{q})$

$$= \frac{1}{\Omega} \int V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} dV = \frac{1}{\Omega} \int V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} dV$$

- **Paar-Erzeugungs** und **Paar-Vernichtungsoperatoren** gehorchen Kommutationsrelationen

$$[P_k, P_{k'}] = 0 \quad [P_k^\dagger, P_{k'}^\dagger] = 0$$

$$[P_k, P_{k'}] = c_{-k,\sigma_2} c_{k,\sigma_1} c_{-k',\sigma_2} c_{k',\sigma_1} - c_{-k',\sigma_2} c_{k',\sigma_1} c_{-k,\sigma_2} c_{k,\sigma_1} = 0$$



- die beiden letzten Operatoren des 1. Terms auf der rechten Seite können durch einer gerade Permutation nach vorne gezogen werden  
 → Vorzeichen bleibt erhalten

# 13.5.2 BCS-Grundzustand

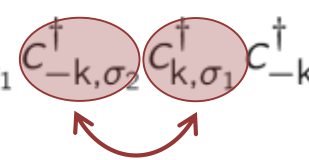
## Formalismus der 2. Quantisierung (3)

$$\begin{aligned}
 [P_k, P_k^\dagger] &= c_{-k, \sigma_2} c_{k, \sigma_1} c_{k, \sigma_1}^\dagger c_{-k, \sigma_2}^\dagger - c_{k, \sigma_1}^\dagger c_{-k, \sigma_2}^\dagger c_{-k, \sigma_2} c_{k, \sigma_1} \\
 &= c_{-k, \sigma_2} \left(1 - c_{k, \sigma_1}^\dagger c_{k, \sigma_1}\right) c_{-k, \sigma_2}^\dagger - c_{k, \sigma_1}^\dagger c_{-k, \sigma_2}^\dagger c_{-k, \sigma_2} c_{k, \sigma_1} \\
 &= \left(1 - c_{k, \sigma_1}^\dagger c_{k, \sigma_1}\right) c_{-k, \sigma_2} c_{-k, \sigma_2}^\dagger - c_{k, \sigma_1}^\dagger c_{-k, \sigma_2}^\dagger c_{-k, \sigma_2} c_{k, \sigma_1} \\
 &= \left(1 - c_{k, \sigma_1}^\dagger c_{k, \sigma_1}\right) \left(1 - c_{-k, \sigma_2}^\dagger c_{-k, \sigma_2}\right) - c_{k, \sigma_1}^\dagger c_{-k, \sigma_2}^\dagger c_{-k, \sigma_2} c_{k, \sigma_1} \\
 &= 1 - n_{k, \sigma_1} - n_{-k, \sigma_2}
 \end{aligned}$$

– **Man beachte:**

- einige der Kommutationsrelationen der Paar-Operatoren sind denen von Bosonen ähnlich, obwohl die Paar-Operatoren nur aus fermionischen Operatoren bestehen
- $[P_k, P_k^\dagger] \neq 0$  aber ungleich  $\delta_{kk'}$ , wie es für Bosonen der Fall ist  
 ➔ Paar-Operatoren kommutieren nicht, sind aber keine bosonischen Operatoren

– **Potenzen der Paar-Operatoren:**

$$P_k^\dagger P_k^\dagger = \left(P_k^\dagger\right)^2 = c_{k, \sigma_1}^\dagger c_{-k, \sigma_2}^\dagger c_{k, \sigma_1}^\dagger c_{-k, \sigma_2}^\dagger = -\underbrace{c_{k, \sigma_1}^\dagger c_{k, \sigma_1}^\dagger}_{=0} \underbrace{c_{-k, \sigma_2}^\dagger c_{-k, \sigma_2}^\dagger}_{=0} = 0$$


➔ Antisymmetrie der fermionischen Wellenfunktion erfordert, dass Potenzen der Paar-Operatoren verschwinden



# 13.5.2 BCS-Grundzustand

## Grundlegende Definitionen und Annahmen

1. Schwache, isotrope WW:  $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0 & \text{für } k' > k_F, k < k_F + \Delta k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$  mit  $\Delta k = \frac{m\omega_D}{\hbar k_F}$ ,  $V_0 D(E_F) \ll 1$

2. Paar- (Gorkov) Amplitude:  $g_{k\sigma_1\sigma_2} \equiv \langle c_{-k\sigma_1} c_{k\sigma_2} \rangle \neq 0$  ← statistischer Mittelwert  
 $g_{k\sigma_1\sigma_2}^\dagger \equiv \langle c_{-k\sigma_2}^\dagger c_{k\sigma_1}^\dagger \rangle \neq 0$

3. Pauli-Prinzip → Paaramplitude ist anti-symmetrisch bezüglich Vertauschung von  $k$  und  $\sigma$

$$g_{-k\sigma_2\sigma_1} = -g_{k\sigma_1\sigma_2}$$

4. Spin-Anteil erlaubt die Unterscheidung zwischen Singulett- und Triplett-Paarung:

$$s = \begin{cases} 0, & m_s = 0 \\ 1, & m_s = -1, 0, +1 \end{cases}$$

Singulett-Paarung

Triplett-Paarung

5. Paar-Potenzial:

$$\Delta_{k\sigma_1\sigma_2} \equiv -\sum_{k'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} g_{k'\sigma_1\sigma_2}$$

$$\Delta_{k'\sigma_1\sigma_2}^\dagger \equiv -\sum_k V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} g_{k\sigma_1\sigma_2}^\dagger$$

statistischer Mittelwert der Paar-Wechselwirkung

# 13.5.2 BCS-Grundzustand

## Hamilton-Operator und BCS-Wellenfunktion

– Hamilton Operator:

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{k,\sigma} \xi_k n_{k,\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$$

mit  $\xi_k = \varepsilon_k - \mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$

$n_{k,\sigma} = c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} =$  Teilchenzahl-Operator

– Lösung der Schrödinger-Gleichung

→ allgemeinste Form der  $N$ -Elektron-Wellenfunktion:

$$|\Psi_N\rangle = \sum g(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_l) c_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_1\downarrow}^\dagger \dots c_{\mathbf{k}_l\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}_l\downarrow}^\dagger |0\rangle$$

$N/2$  Teilchen auf  $M$  Plätzen:

$$\frac{M!}{[M - (N/2)]! (N/2)!}$$

**Problem:** riesige Zahl von Realisierungen, typischerweise  $10^{10^{20}}$

→ **“Mean Field” Ansatz:** Besetzungswahrscheinlichkeit von Zustand  $\mathbf{k}$  hängt nur von **mittlerer Bestzungswahrscheinlichkeit** der anderen Zustände ab

– **Bardeen, Cooper** und **Schrieffer** benutzten folgenden Ansatz:

$$\psi_{\text{BCS}} = \prod_{k=k_1, k_2, \dots, k_M} (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle$$

$|u_k|^2 =$  Wahrscheinlichkeit, dass Paarzustand  $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$  nicht besetzt ist

$|v_k|^2 =$  Wahrscheinlichkeit, dass Paarzustand  $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$  besetzt ist

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$$

# 13.5.2 BCS-Grundzustand

Wie könnte man die BCS-Vielteilchen-Wellenfunktion erraten?

$$\psi_{\text{BCS}} = \prod_{k=k_1, k_2, \dots, k_M} (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle$$

→ Wir machen die Annahme, dass die makroskopische Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}$  durch einen **kohärenten Vielteilchen-Zustand von Fermionen** beschrieben werden kann

## – kohärenter bosonischer Vielteilchen-Zustand

wurde zuerst von **Erwin Schrödinger** (1926) diskutiert, als er nach einem Zustand für den quantenmechanischen harmonischen Oszillator suchte, der am besten das Verhalten eines klassischen harmonischen Oszillators beschreibt

E. Schrödinger, Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik, Die Naturwissenschaften 14, 664-666 (1926).

Weiterentwicklung durch **Roy J. Glauber** → Übertragung auf Fock-Raum

R. J. Glauber, Coherent and Incoherent States of the Radiation Field, Phys. Rev. 131, 2766-2788 (1963).

Nobel Prize in Physics 2005 "**for his contribution to the quantum theory of optical coherence**", with the other half shared by John L. Hall and Theodor W. Hänsch.

# 13.5.2 BCS-Grundzustand

## Fock-Zustands-Darstellung eines kohärenten bosonischen Zustands

- **kohärenter Zustand  $|\alpha\rangle$**  wird durch eine Linearkombination von unendlich vielen Fock-Zuständen  $|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle$  dargestellt

bosonischer Erzeugungsoperator

Vakuum-Zustand

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\phi_n\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{(\alpha a^\dagger)} |0\rangle$$

Schrödinger (1926)

Normalisierung

$\alpha = |\alpha|e^{i\varphi}$  ist eine komplexe Zahl

- Wahrscheinlichkeit für die Besetzung von  $n$  Teilchen ist durch Poisson-Verteilung gegeben

$$P(n) = |\langle \phi_n | \alpha \rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}$$

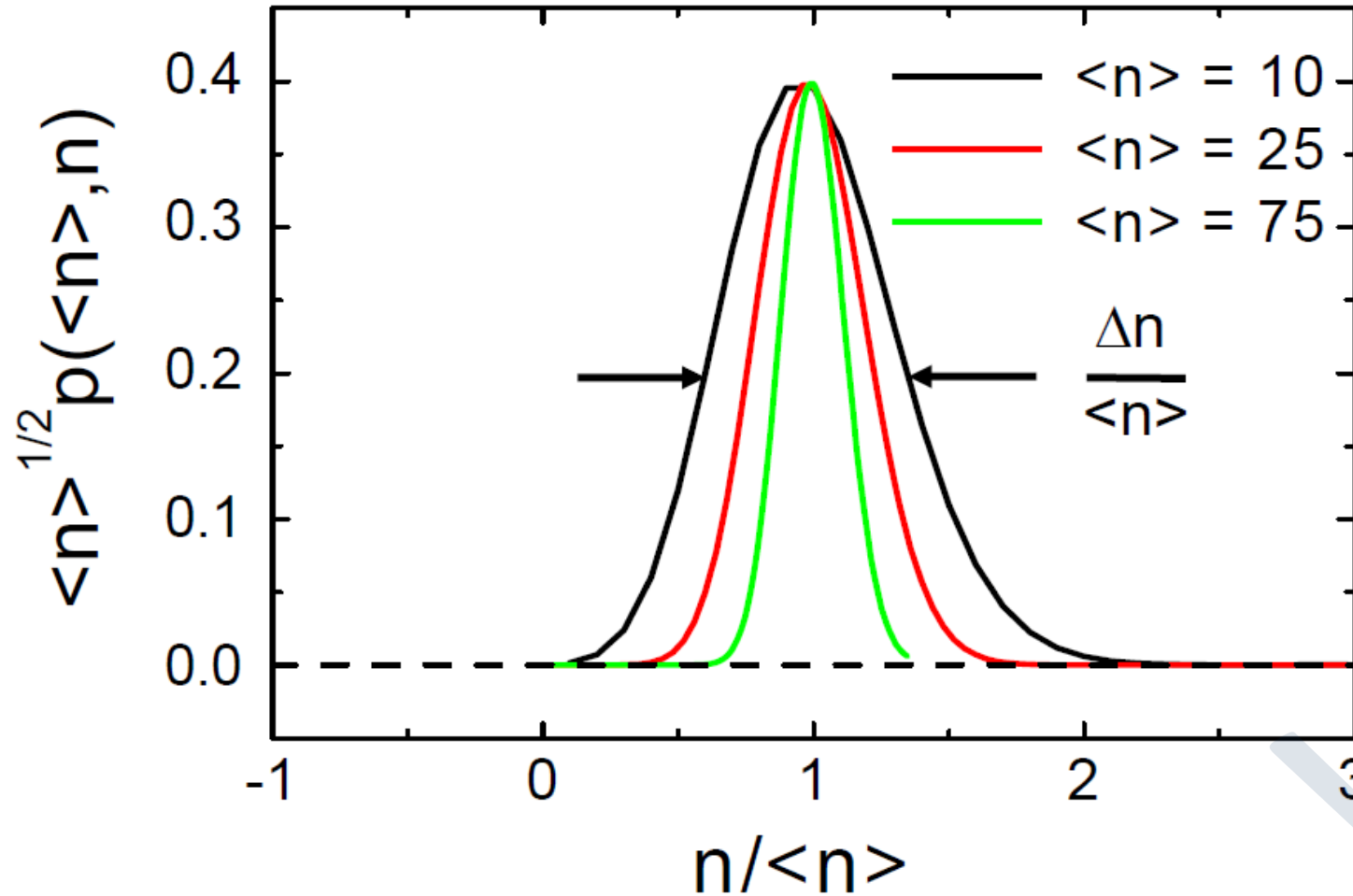
- Erwartungswert des Teilchenzahl-Operators:  $N = |\alpha|^2, \quad \Delta N = |\alpha| = \sqrt{N} \gg 1$
- relative Standardabweichung:  $\frac{\Delta N}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \ll 1 \quad (\text{da } N \gg 1)$
- Unschärferelation:  $\Delta N \Delta \varphi \geq \frac{1}{2}, \quad \Delta \varphi \ll 1$

- **Anwendung:** kohärenter photonischer Zustand (Laser-Licht)



# 13.5.2 BCS-Grundzustand

Poisson-Verteilung  $P(n)$  für unterschiedliche Erwartungswerte  $N = \langle n \rangle$



# 13.5.2 BCS-Grundzustand

## Fock-Zustands-Darstellung eines kohärenten fermionischen Zustands

- kohärenter bosonischer Zustand  $|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \exp(\alpha a^\dagger) |0\rangle$
- kohärenter fermionischer Zustand  $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = c_1 \exp\left(\sum_k \alpha_k P_k^\dagger\right) |0\rangle$
- wir nutzen aus, dass höhere Potenzen von fermionischen Erzeugungsoperatoren wegen Pauli-Prinzip verschwinden (*entscheidender Unterschied zu bosonischem System*):

$$P_k^\dagger P_k^\dagger = (P_k^\dagger)^2 = c_{k,\sigma_1}^\dagger c_{-k,\sigma_2}^\dagger c_{k,\sigma_1}^\dagger c_{-k,\sigma_2}^\dagger = -c_{k,\sigma_1}^\dagger c_{k,\sigma_1}^\dagger c_{-k,\sigma_2}^\dagger c_{-k,\sigma_2}^\dagger = 0$$

$$\rightarrow |\Psi_{\text{BCS}}\rangle = c_1 \exp\left(\sum_k \alpha_k P_k^\dagger\right) |0\rangle = c_1 \prod_k \exp(\alpha_k P_k^\dagger) |0\rangle = c_1 \prod_k (1 + \alpha_k P_k^\dagger) |0\rangle$$

- **Normierung:**  $\langle \Psi_{\text{BCS}}^* | \Psi_{\text{BCS}} \rangle = 1 = c_1 \left\langle 0 \left| \prod_k (1 + \alpha_k^* P_k) (1 + \alpha_k P_k^\dagger) \right| 0 \right\rangle$

$$\psi_{\text{BCS}} = \prod_k \frac{1}{1 + |\alpha_k|^2} (1 + \alpha_k P_k^\dagger) |0\rangle$$

erfüllt, falls alle Faktoren = 1  $\rightarrow 1 = c_1 \langle 0 | (1 + \alpha_k^* P_k) (1 + \alpha_k P_k^\dagger) | 0 \rangle = c_1^2 (1 + |\alpha_k|^2)$

# 13.5.2 BCS-Grundzustand

## BCS-Grundzustand als kohärenter bosonischer Zustand

$$\Rightarrow |\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) |0\rangle$$

$$\left. \begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{\sqrt{1 + |\alpha_{\mathbf{k}}|^2}} \\ v_{\mathbf{k}} &= \frac{\alpha_{\mathbf{k}}}{\sqrt{1 + |\alpha_{\mathbf{k}}|^2}} \end{aligned} \right\} \text{Kohärenzfaktoren}$$

**kohärente Superposition von Paarzuständen**

**→ nur mittlere Zahl von Paaren ist festgelegt**

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

$$\Delta N = \sqrt{N} \gg 1$$

$$\frac{\Delta N}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}} \ll 1$$

Unschärfe von  $N$  ist bei großer mittlerer Teilchenzahl  $\bar{N}$  verschwindend klein

$$\Delta N \Delta \varphi \geq \frac{1}{2} \Rightarrow \Delta \varphi \ll 1$$

Unschärfe von  $\varphi$  ist bei großem  $\bar{N}$  ebenfalls verschwindend klein

–  $u_{\mathbf{k}}$  und  $v_{\mathbf{k}}$  sind komplexe Wahrscheinlichkeitsamplituden

$|u_{\mathbf{k}}|^2$  = Wahrscheinlichkeit, dass Paarzustand  $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$  nicht besetzt ist

$|v_{\mathbf{k}}|^2$  = Wahrscheinlichkeit, dass Paarzustand  $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$  besetzt ist

# 13.5.2 BCS-Grundzustand

## Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsamplituden

- **Aufgabe:** bestimme die Wahrscheinlichkeitsamplituden  $u_k$  und  $v_k$  in selbstkonsistenter Weise durch Minimierung von

$$\langle E_{\text{BCS}} \rangle = \langle \psi_{\text{BCS}} | \underbrace{\mathcal{H}_{\text{BCS}} - \mu \mathcal{N}_p}_{\text{„Mean-Field“ BCS Hamiltonian}} | \psi_{\text{BCS}} \rangle$$

$$\text{mit } \langle \mathcal{N}_p \rangle = \langle \sum_{k,\sigma} n_{k\sigma} \rangle = \bar{N}$$

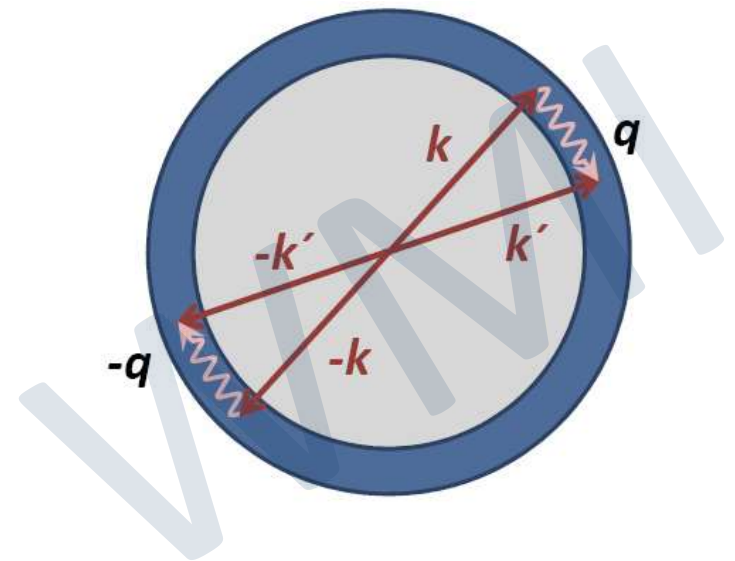
$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k n_{k,\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$$

- Minimierung des Erwartungswerts mittels **Variationsrechnung**:

$$\delta \left\langle \psi_{\text{BCS}} \left| \underbrace{\sum_{k,\sigma} \xi_k n_{k,\sigma}}_{\text{kinetische Energie}} + \underbrace{\sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}}_{\text{Wechselwirkungsenergie}} \right| \psi_{\text{BCS}} \right\rangle = 0$$

hierbei ist  $\xi_k$  die Einteilchenenergie bezogen auf das chemische Potenzial

$$\xi_k = \varepsilon_k - \mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$$





# 13.5.2 BCS-Grundzustand

Ergebnis (Herleitung siehe R. Gross & A. Marx, Festkörperphysik, 3. Auflage bzw. Spezialvorlesung „Supraleitung“)

$$|v_k|^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right]$$

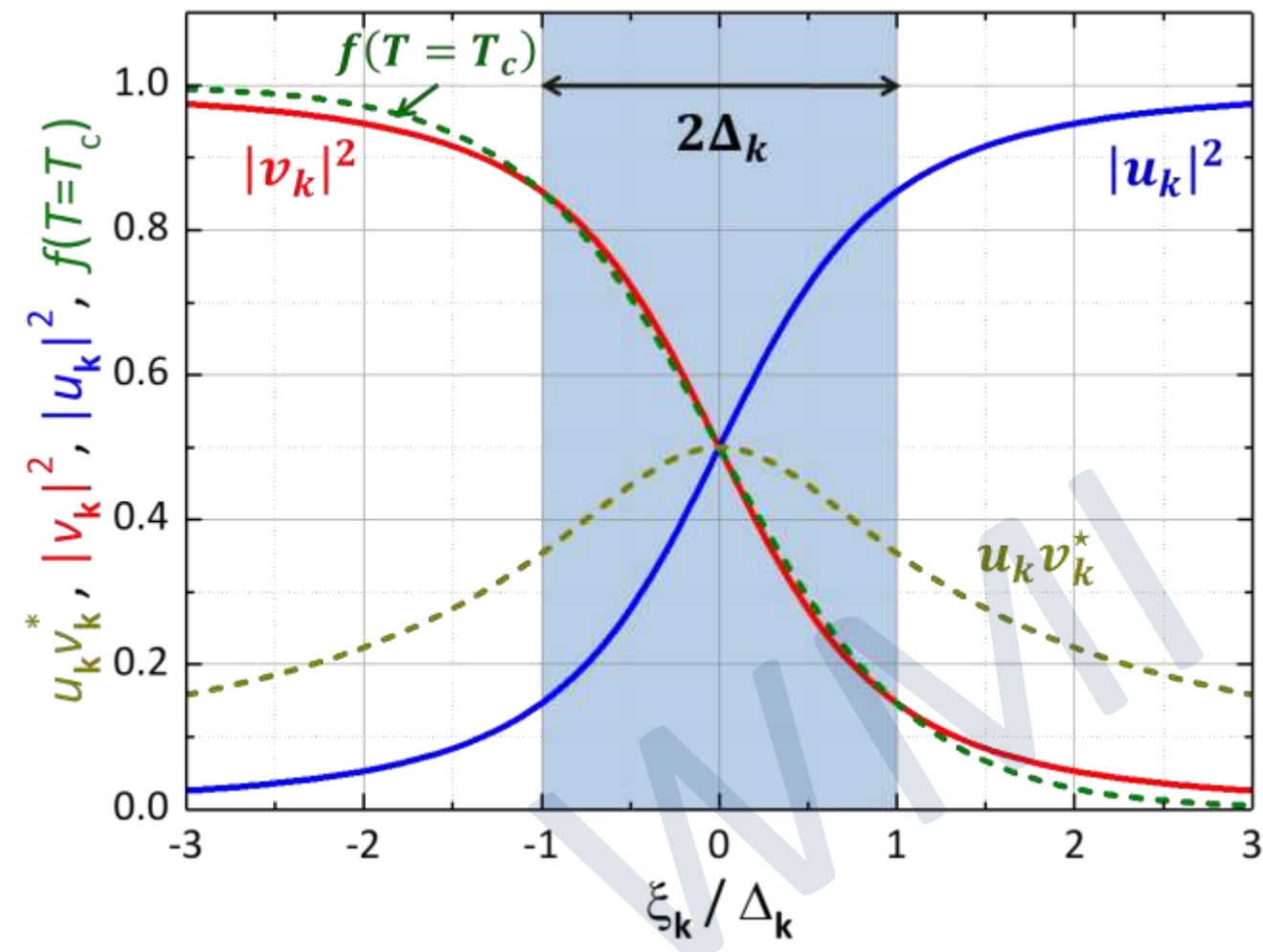
$$|u_k|^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right]$$

$$u_k v_k^* = g_k = \frac{\Delta_k^\dagger}{2E_k}$$

$$u_k^* v_k = g_k^\dagger = \frac{\Delta_k}{2E_k}$$

mit  $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}$   
 Paaramplitude

- $|v_k|^2$ : Wahrscheinlichkeit, dass Paarzustand ( $\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$ ) besetzt ist, ist auch bei  $T = 0$  um  $E_F$  ausgeschmiert
  - ➔ Erhöhung der kinetischen Energie (interessant:  $|v_k|^2(\xi_k) \approx f(\xi_k, T = T_c)$ )
- Verschmierung ist notwendig, um Paarwechselwirkung zu ermöglichen
  - ➔ Reduktion der potenziellen Energie > Erhöhung der kinetischen Energie



➔ **vergleiche Bandferromagnetismus**

# 13.5.2 BCS-Grundzustand

Umschreiben des BCS-Hamiltonian mit Hilfe von Ausdrücken für  $u_k, v_k, E_k$  (Rechnung siehe Gross & Marx, Festkörperphysik)

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_{k,\sigma} \xi_k n_{k,\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$$

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \underbrace{\sum_k [\xi_k - E_k + g_k^\dagger \Delta_k]} + \underbrace{\sum_k E_k [\alpha_k^\dagger \alpha_k - \beta_k^\dagger \beta_k]}$$

Bogoliubov-Transformation

$$\alpha_k = u_k^* c_{k\uparrow} - v_k^* c_{-k\downarrow}^\dagger$$

$$\beta_k = v_k^* c_{k\uparrow}^\dagger + u_k^* c_{-k\downarrow}$$

$$\alpha_k^\dagger = u_k c_{k\uparrow}^\dagger - v_k c_{-k\downarrow}$$

$$\beta_k^\dagger = v_k c_{k\uparrow} + u_k c_{-k\downarrow}^\dagger$$

- **Grundzustandsenergie**
- weicht von derjenigen des Normalzustands um Kondensationsenergie ab
- **spinlose Anregungen** aus dem Grundzustand mit Teilchenzahloperatoren  $\alpha_k^\dagger \alpha_k$  und  $\beta_k^\dagger \beta_k$  und Energien  $E_k$  und  $-E_k$
- Anregungen (Quasiteilchen) sind spinlos, da sie Linearkombinationen von Elektronen und Löchern mit entgegengesetztem Spin sind
- 2 Spin-Freiheitsgrade → 2 Linearkombinationen von Elektron-Loch-Spin-Singulets
- $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}$  ist Anregungsenergie von Quasiteilchen  
 $|\Delta_k|$  ist Lücke im Anregungsspektrum

# 13.5.2 BCS-Grundzustand

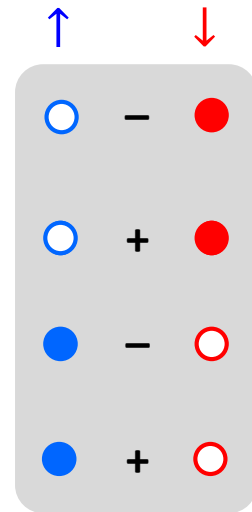
## Quasiteilchenanregungen

$$\begin{aligned}\alpha_k &= u_k^* c_{k\uparrow} - v_k^* c_{-k\downarrow}^\dagger \\ \beta_k^\dagger &= v_k c_{k\uparrow} + u_k c_{-k\downarrow}^\dagger \\ \alpha_k^\dagger &= u_k c_{k\uparrow}^\dagger - v_k c_{-k\downarrow} \\ \beta_k &= v_k^* c_{k\uparrow}^\dagger + u_k^* c_{-k\downarrow}\end{aligned}$$

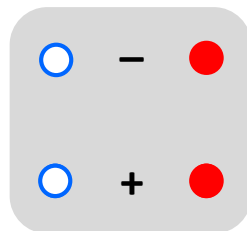
$$\begin{aligned}\xi_k &= 0 \\ |u_k|^2 &= |v_k|^2 = \frac{1}{2}\end{aligned}$$

→

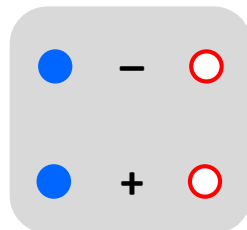
$$\begin{aligned}\alpha_k &= 1/\sqrt{2} (c_{k\uparrow} - c_{-k\downarrow}^\dagger) \\ \beta_k^\dagger &= 1/\sqrt{2} (c_{k\uparrow} + c_{-k\downarrow}^\dagger) \\ \alpha_k^\dagger &= 1/\sqrt{2} (c_{k\uparrow}^\dagger - c_{-k\downarrow}) \\ \beta_k &= 1/\sqrt{2} (c_{k\uparrow}^\dagger + c_{-k\downarrow})\end{aligned}$$



→ symmetrische und anti-symmetrische Superposition von Elektron- und Lochzuständen mit entgegengesetzter Spin-Richtung



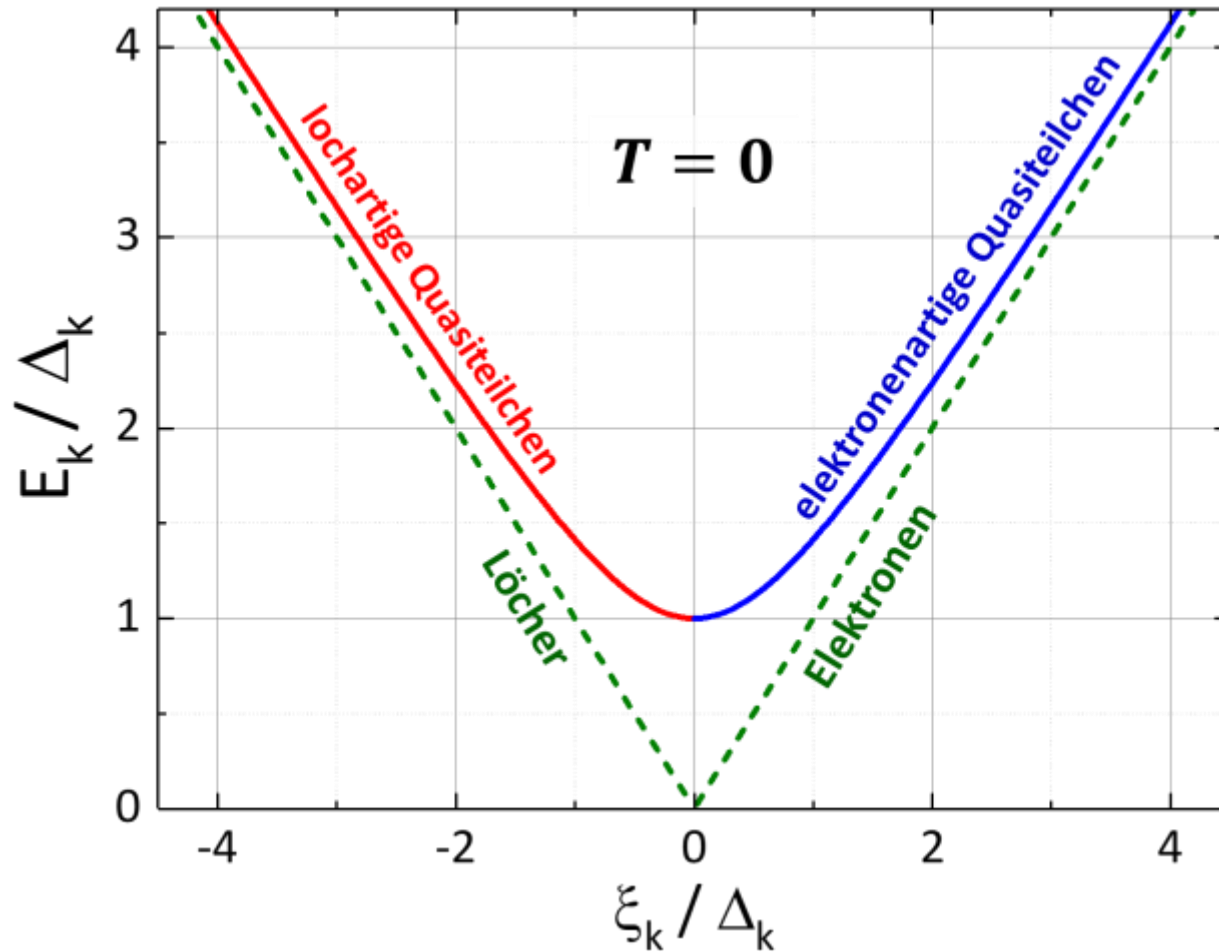
→ **reduziert** Gesamtimpuls um  $k$  und Gesamtspin um  $\hbar/2$   
**lochartige Anregung**



→ **erhöht** Gesamtimpuls um  $k$  und Gesamtspin um  $\hbar/2$   
**teilchenartige Anregung**

# 13.5.2 BCS-Grundzustand

## Anregungsspektrum der Quasiteilchen und Energielücke



**Quasiteilchenanregung: Superposition von Elektron- und Loch-Zuständen**

**Grund:** Einteilchenanregung mit  $k$  kann nur dann existieren, wenn gleichzeitig ein Loch mit  $-k$  existiert, ansonsten würde Paarzustand vorliegen

### Anregungsenergie

$$E_k = E_{-k} = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}$$

Energielücke  $|\Delta_k|$  muss durch Minimierung der freien Energie hinsichtlich Variation von  $\Delta_k$  bestimmt werden:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \Delta_k} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \Delta_k^\dagger} = 0$$

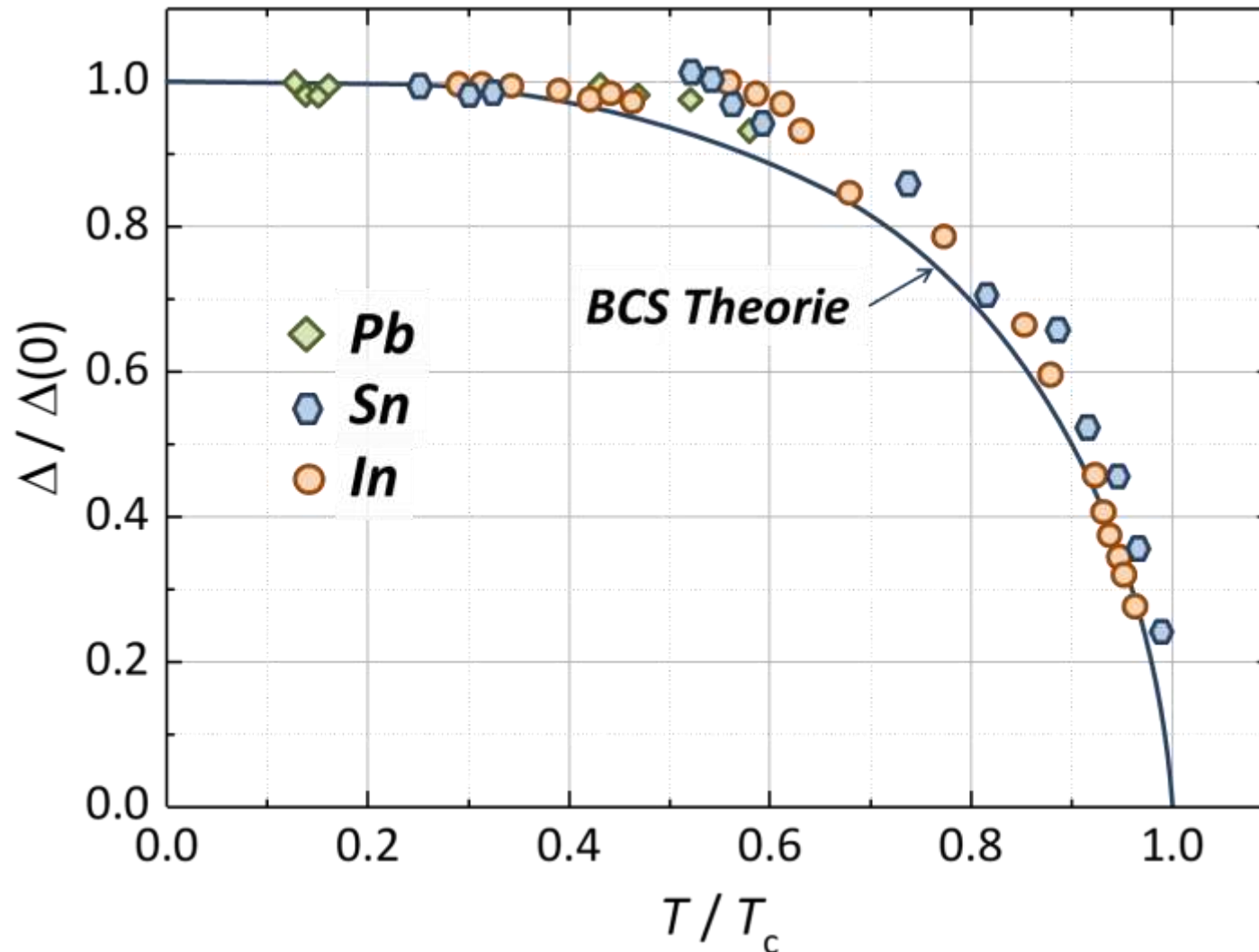
### Energielückengleichung

$$\Delta_k = - \sum_{k'} V_{k,k'} \Delta_{k'} \frac{\tanh(E_{k'}/k_B T)}{2E_{k'}}$$



# 13.5.2 BCS-Grundzustand

## Temperaturabhängigkeit der Energielücke



– für  $V_{k,k'} = -V_0$ ,  $\Delta_k = \Delta$ :

**Energielücke bei  $T = 0$**  ( $V_0 D(E_F) \ll 1$ )

$$\Delta(0) \approx 2 \hbar \omega_D e^{-2/V_0 D(E_F)}$$

**Sprungtemperatur  $T_c$**  ( $V_0 D(E_F) \ll 1$ )

$$k_B T_c \approx 1.134 \hbar \omega_D e^{-2/V_0 D(E_F)}$$

→  $\frac{\Delta(0)}{k_B T_c} \approx 1.764$

*zentrale Vorhersage der BCS-Theorie*

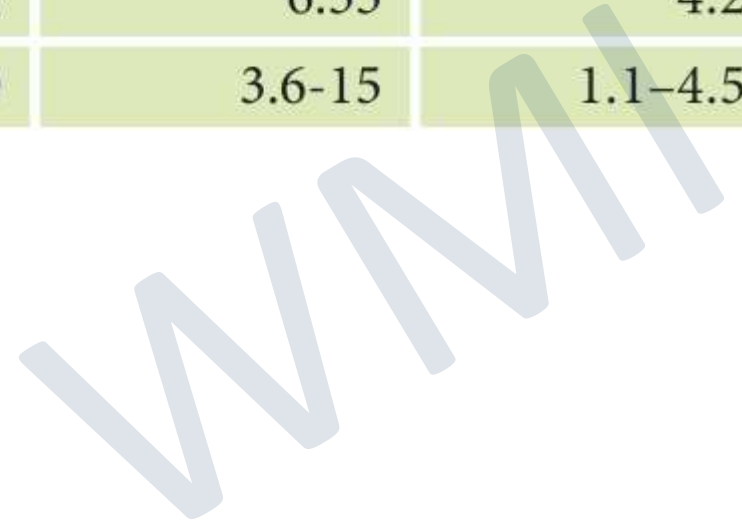
# 13.5.2 BCS-Grundzustand

## Verhältnis von Energielücke und Sprungtemperatur

	$T_c$ (K)	$2\Delta(0)$ (meV)	$2\Delta(0)/k_B T_c$		$T_c$ (K)	$2\Delta(0)$ (meV)	$2\Delta(0)/k_B T_c$
Al	1.19	0.36	$3.5 \pm 0.1$	In	3.4	1.05	$3.5 \pm 0.1$
Nb	9.25	2.90	3.6	Hg	4.15	1.65	$4.6 \pm 0.1$
Pb	7.2	2.70	$4.3 \pm 0.05$	Sn	3.72	1.15	$3.5 \pm 0.1$
Ta	4.29	1.30	$3.5 \pm 0.1$	Tl	2.38	0.75	$3.6 \pm 0.1$
NbN	16	4.65	3.6	Nb <sub>3</sub> Sn	18	6.55	4.2
NbSe <sub>2</sub>	7	2.2	3.7	MgB <sub>2</sub>	40	3.6-15	1.1-4.5

Vorhersage der BCS-Theorie:

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c} \approx 3.528$$



# 13.5.2 BCS-Grundzustand

## Grundzustandsenergie

$$E_{\text{kond}}(0) = \langle \mathcal{H}_{\text{BCS}} \rangle - \langle \mathcal{H}_n \rangle = -\frac{1}{4} D(E_F) \Delta^2(0)$$

$D(E_F)$ : DOS für beide Spin-Richtungen

- Zahl der Cooper-Paare:  $\frac{D(E_F)}{2} \Delta(0)$
- mittlerer Energiegewinn pro Cooper-Paar:  $-\Delta(0)/2$

- Vergleich mit der Thermodynamik  $\mathcal{G}_s - \mathcal{G}_n = B_{\text{cth}}^2(0)/2\mu_0$



$$B_{\text{cth}}(0) = \sqrt{\frac{\mu_0 D(E_F) \Delta^2(0)}{2V}}$$

- Abschätzung der mittleren Energieabsenkung pro Elektron in einem Metall

mit  $\frac{D(E_F)}{V} = \frac{3n}{2E_F}$  und  $\frac{\Delta(0)}{k_B T_c} = 1.764$  folgt:

$$\frac{E_{\text{kond}}(0)}{V} = -\frac{3}{8} n \frac{\Delta^2(0)}{E_F} = 1.167 n \frac{(k_B T_c)^2}{E_F}$$

$$\frac{E_{\text{kond}}(0)}{nV} = \frac{E_{\text{kond}}(0)}{N} = k_B T_c \cdot \frac{k_B T_c}{E_F}$$

Energieskala der WW

Anteil der teilnehmenden Elektronen

## • BCS Grundzustand

- Benutzung der Schreibweise der 2. Quantisierung

→ **Elektronenerzeugungs-** und **Vernichtungsoperatoren**:  $c_{k,\sigma}^\dagger, c_{k,\sigma}$

- Operator für Streuung eines Elektronenpaares aus Zustand  $(\mathbf{k}'\sigma_1, -\mathbf{k}'\sigma_2)$  Zustand  $(\mathbf{k}\sigma_1, -\mathbf{k}\sigma_2)$

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma_1, \sigma_2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \underbrace{c_{\mathbf{k}, \sigma_1}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \sigma_2}^\dagger}_{P_{\mathbf{k}}^\dagger} \underbrace{c_{-\mathbf{k}', \sigma_2} c_{\mathbf{k}', \sigma_1}}_{P_{\mathbf{k}'}}$$

Paarerzeuger  $P_{\mathbf{k}}^\dagger$       Paarvernichter  $P_{\mathbf{k}'}$

- Erwartungswerte für Paarerzeuger und Paarvernichter → **Paaramplitude** (kann als OP betrachtet werden)

$$g_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2} \equiv \langle c_{-\mathbf{k}\sigma_2} c_{\mathbf{k}\sigma_1} \rangle \neq 0; \quad g_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2}^\dagger \equiv \langle c_{\mathbf{k}\sigma_1}^\dagger c_{-\mathbf{k}\sigma_2}^\dagger \rangle \neq 0$$

- Pauli-Prinzip erfordert (antisymmetrisch bezüglich Austausch von  $\sigma_{1,2}$  und  $k_{1,2}$ )

$$g_{-\mathbf{k}\sigma_2\sigma_1} = -g_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2} \quad \rightarrow \text{Spin-Singulett: symmetrisch bez. Austausch von } k_1 \text{ und } k_2$$

Spin-Triplett: antisymmetrisch bez. Austausch von  $k_1$  und  $k_2$

- alternativ zu **Paaramplitude** kann **Paarpotenzial** als OP verwendet werden

$$\Delta_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2} \equiv - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'\sigma_1\sigma_2}; \quad \Delta_{\mathbf{k}'\sigma_1\sigma_2}^\dagger \equiv - \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2}^\dagger$$

## • BCS Vielteilchenwellenfunktion

- phänomenologische Beschreibung war gut mit makroskopischer Wellenfunktion, also kohärentem Vielteilchenzustand, möglich:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) e^{i\theta(\mathbf{r}, t)}$$

- **Aufgabe**: konstruiere kohärenten Zustand für supraleitendes Elektronensystem

# Zusammenfassung: Teil 30b, 07.06.2021/2

– **Aufgabe:** konstruiere kohärenten Zustand für supraleitendes Elektronensystem

➤ Aufgabe wäre einfach für **Bosonen**:

- idealer kohärenter Zustand  $|\alpha\rangle$  als Überlagerung von Zuständen fester Teilchenzahl (Fock-Zustände)

- unendliche Linearkombination von Fock-Zuständen  $|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle$  mit fester Teilchenzahl

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\phi_n\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha a^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{(\alpha a^\dagger)} |0\rangle$$

➤ Wahrscheinlichkeit für die Besetzung von  $n$  Teilchen entspricht Poisson-Verteilung

→ Erwartungswerte:  $\bar{N} = |\alpha|^2$ , Unschärfe:  $\frac{\Delta N}{\bar{N}} = \frac{1}{\sqrt{\bar{N}}}$  (wird klein bei großem  $\bar{N}$ ),  $\Delta N \Delta \varphi = \frac{1}{2}$

→ Verwendung von  $|\alpha\rangle$  für bosonischen Grundzustand: e.g. Laserlicht, Bose-Einstein-Kondensat

– **Analoge Aufgabe:** konstruiere äquivalenten kohärenten Zustand aus den **fermionischen Wellenfunktionen** der Elektronen eines freien Elektronengases

➤ wir benötigen die Eigenschaften von Potenzen der Paarerzeuger

$$P_k^\dagger P_k^\dagger = (P_k^\dagger)^2 = c_{k,\sigma_1}^\dagger c_{-k,\sigma_2}^\dagger c_{k,\sigma_1}^\dagger c_{-k,\sigma_2}^\dagger = -c_{k,\sigma_1}^\dagger c_{k,\sigma_1}^\dagger c_{-k,\sigma_2}^\dagger c_{-k,\sigma_2}^\dagger = 0$$

➤ in Analogie zu Zustand  $|\alpha\rangle$  erhalten wir unter Benutzung der Vertauschungsrelationen für die Paarerzeuger

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = c_1 \exp\left(\sum_k \alpha_k P_k^\dagger\right) |0\rangle = c_1 \prod_k \exp(\alpha_k P_k^\dagger) |0\rangle = c_1 \prod_k (1 + \alpha_k P_k^\dagger) |0\rangle$$

alle Terme mit Potenzen  $\geq 2$  verschwinden (Pauli-Prinzip)

➤ Normierung:  $\langle \Psi_{\text{BCS}}^* | \Psi_{\text{BCS}} \rangle = 1 = c_1 \left\langle 0 \left| \prod_k (1 + \alpha_k^* P_k) (1 + \alpha_k P_k^\dagger) \right| 0 \right\rangle$

➔ **BCS-Vielteilchenwellenfunktion**

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) |0\rangle$$

mit so genannten „**Kohärenzfaktoren**“

$$u_k = \frac{1}{\sqrt{1 + |\alpha_k|^2}} \quad v_k = \frac{\alpha_k}{\sqrt{1 + |\alpha_k|^2}} \quad |u_k| + |v_k|^2 = 1$$

Kohärenzfaktoren  $|u_k|^2$  und  $|v_k|^2$  geben die Wahrscheinlichkeiten dafür an, dass ein Paarzustand mit Wellenvektor  $k$  unbesetzt bzw. besetzt ist

# Zusammenfassung: Teil 30c, 07.06.2021/2

– **Wichtig:**

- die Wellenfunktion  $|\Psi_{\text{BCS}}\rangle$  stellt eine kohärente Superposition von Zuständen mit 0, 1, 2, 3, ... Elektronenpaaren dar  $\rightarrow$  nur die mittlere Teilchenzahl  $\bar{N}$  ist festgelegt!!
- da  $\frac{\Delta N}{\bar{N}} = \frac{1}{\sqrt{\bar{N}}}$ , ist die relative Unschärfe von  $N$  bei großer mittlerer Teilchenzahl  $\bar{N}$  vernachlässigbar klein
- es gilt ferner  $\Delta N \Delta\varphi = \frac{1}{2}$ , da  $\Delta N$  sehr groß, ist Phasenunschärfe  $\Delta\varphi$  sehr klein

• **Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsamplituden  $u_k$  und  $v_k$  durch Variationsrechnung**

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \sum_k [\varepsilon_k - E_k + g_k^\dagger \Delta_k] + \sum_k E_k [\alpha_k^\dagger \alpha_k - \beta_k^\dagger \beta_k]$$

$$\langle E_{\text{BCS}} \rangle = \langle \psi_{\text{BCS}} | \mathcal{H}_{\text{BCS}} - \mu \mathcal{N}_p | \psi_{\text{BCS}} \rangle$$

chemisches Potenzial  $\rightarrow$   $\mu$       Gesamtteilchenzahl  $\rightarrow$   $\mathcal{N}_p$

$$\delta \langle \psi_{\text{BCS}} | \sum_{k,\sigma} \xi_k n_{k,\sigma} + \sum_{k,k'} V_{k,k'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} | \psi_{\text{BCS}} \rangle = 0 \quad \xi_k = \varepsilon_k - \mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$$

Ergebnis:  $|u_k|^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right]$      $|v_k|^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right]$     mit  $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}$

• **Anregungen aus dem Grundzustand (Quasiteilchen), Energielücke und Kondensationsenergie**

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = \underbrace{\sum_k [\xi_k - E_k + g_k^\dagger \Delta_k]}_{\text{Grundzustandsenergie}} + \underbrace{\sum_k E_k [\alpha_k^\dagger \alpha_k - \beta_k^\dagger \beta_k]}_{\text{spinlose Anregungen}}$$

aus dem Grundzustand:  $E_k = E_{-k} = \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta_k|^2}$

– für  $V_{k,k'} = -V_0$ ,  $\Delta_k = \Delta$ : **Energielücke bei  $T = 0$**

$$\Delta(0) \simeq 2 \hbar \omega_D e^{-2/V_0 D(E_F)}$$

**Sprungtemperatur  $T_c$**

$$k_B T_c \simeq 1.134 \hbar \omega_D e^{-2/V_0 D(E_F)}$$

$$\frac{\Delta(0)}{k_B T_c} \simeq 1.764$$

**Kondensationsenergie**

$$E_{\text{kond}}(0) = \langle \mathcal{H}_{\text{BCS}} \rangle - \langle \mathcal{H}_n \rangle = -D(E_F) \Delta^2(0) / 4$$