Fakultät für Physik
Prof. Rupert Huber, Prof. Milena Grifoni

WS 15/16

Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik
Blatt 10

Übungsleiter:

Dr. Andrea Donarini (3.1.24, phone 2040) (Theorie, Thu 8:30h - 12h, Phy 2.1.29)
Dr. Christoph Lange (2.0.07, phone 5704) (Experiment, Fr 12:30h - 14:00h, Phy 2.1.29)

Part I: Theory

10.1 Wick's theorem

a) Show that, for a system of non-interacting fermions described by the Hamiltonian in the energy basis

$$\hat{H} = \sum_\alpha \epsilon_\alpha \hat{c}^\dagger_\alpha \hat{c}_\alpha \left(= \sum_{i=1}^{N} \hat{h}_i \right)$$

the following relation for the many-body grandcanonical expectation value holds:

$$\langle \hat{c}^\dagger_{\alpha_1} \hat{c}^\dagger_{\alpha_2} \hat{c}_{\alpha_3} \hat{c}_{\alpha_4} \rangle = \langle \hat{c}^\dagger_{\alpha_1} \hat{c}_{\alpha_4} \rangle \langle \hat{c}^\dagger_{\alpha_2} \hat{c}_{\alpha_3} \rangle \delta_{\alpha_1\alpha_4}\, \delta_{\alpha_2\alpha_3} - \langle \hat{c}^\dagger_{\alpha_1} \hat{c}_{\alpha_3} \rangle \langle \hat{c}^\dagger_{\alpha_2} \hat{c}_{\alpha_4} \rangle \delta_{\alpha_1\alpha_3}\, \delta_{\alpha_2\alpha_4},$$

where

$$\langle \hat{c}^\dagger_{\alpha_1} \hat{c}^\dagger_{\alpha_2} \hat{c}_{\alpha_3} \hat{c}_{\alpha_4} \rangle \equiv \frac{1}{Z} \operatorname{Tr} \left\{ \hat{c}^\dagger_{\alpha_1} \hat{c}^\dagger_{\alpha_2} \hat{c}_{\alpha_3} \hat{c}_{\alpha_4} \ \exp\left[-\beta(H - \mu N)\right] \right\}$$

and Z is the grandcanonical partition function. The trace is taken over the full Fock space. **(2 Points)**

b) Derive from a) that, for noninteracting fermions, in every other given single particle basis $\{|n\rangle\}$ the following relation holds:

$$\langle \hat{c}^\dagger_{n_1} \hat{c}^\dagger_{n_2} \hat{c}_{n_3} \hat{c}_{n_4} \rangle = \langle \hat{c}^\dagger_{n_1} \hat{c}_{n_4} \rangle \langle \hat{c}^\dagger_{n_2} \hat{c}_{n_3} \rangle - \langle \hat{c}^\dagger_{n_1} \hat{c}_{n_3} \rangle \langle \hat{c}^\dagger_{n_2} \hat{c}_{n_4} \rangle.$$

Note that this is valid even if in this basis the Hamiltonian

$$\hat{H} = \sum_{n,m} h_{nm} \hat{c}^\dagger_n \hat{c}_m$$

would contain non-diagonal terms, h_{nm} for $n \neq m$. Hint: Diagonalize H first, using a unitary transformation $\hat{c}_n = \sum_\alpha u_{n\alpha} \hat{c}_\alpha$. Apply the relation proven in a). Finally perform the canonical transformation in the reverse direction. **(2 Points)**

10.2 Bogoliubov transformation for Fermions

Consider a set of electrons described by the momentum and spin quantum numbers $\{\mathbf{k}\sigma\}$. Their Fock space is generated by the creator operators $c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}$. Moreover define on this set of operators the Bogoliubov transformation:

$$\alpha^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} = u_{\bar{\mathbf{k}}}\, c^\dagger_{\mathbf{k}\sigma} + \operatorname{sign}(\sigma) v^*_{\bar{\mathbf{k}}}\, c_{\bar{\mathbf{k}}\,\bar{\sigma}}\,, \tag{1}$$

where $\bar{\sigma} = -\sigma$ and $\bar{\mathbf{k}} = -\mathbf{k}$.

a) Prove that the condition ensuring that the new set of operators $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}$ satisfy fermionic anticommutation relations is $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$. **(1 Point)**

b) The transformation introduced above diagonalizes the mean field Hamiltonian of the Bardeen Cooper Schrieffer theory of superconductivity. The latter reads:

$$H_{BCS}^{MF} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta\, c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta^{*}\, c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \tag{2}$$

where the single particle energy is measured starting from the chemical potential: $\xi_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$. Prove that the Bogoliubov transformation (1) brings the Hamiltonian (2) into the form

$$\sum_{\mathbf{k}\sigma} E_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\sigma} + \text{constant},$$

where

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}$$

under appropriate choice of the $u_{\mathbf{k}}$ and $v_{\mathbf{k}}$ coefficients.

(2 Points)

c) **(in class)** Consider the Bogoliubov transformation applied to a normal system ($\Delta = 0$). How does the Hamiltonian look like in terms of the operators $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}$ and $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$? In which sense the operator $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ creates a quasi particle excitation? Which is the spectrum of these excitations as a function of $\xi_{\mathbf{k}}$?

d) Calculate the density of states $d_s(\epsilon)$ for the quasi-particle excitations of a superconductor described by the BSC Hamiltonian (2). Prove that, in the limit $\epsilon, |\Delta| \ll \mu$ the following relation holds:

$$\frac{d_s(\epsilon)}{d_n(0)} = \theta(\epsilon - |\Delta|) \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2}}$$

where $d_n(0)$ is the density of states of the zero energy quasi-particle excitations of a normal metal ($\Delta = 0$).

Hint: Remember the definition of density of states: $d(\epsilon) = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \delta(\epsilon - \epsilon_{\alpha})$.

(3 Points)

Part II: Experiment

10.1 Dreidimensionales System stark gebundener Elektronen

Die Bandstruktur des vereinfachten Tight-Binding-Modells hat die Form

$$E(\vec{k}) = E_0 - \beta \sum_j \exp^{i\vec{k}\vec{R}_j}, \tag{3}$$

wobei die Summe über Vektoren des Bravais-Gitters läuft, die den Ursprung mit seinen nächsten Nachbarn verbinden, und β das Transferintegral bezeichnet.

(a) Berechnen Sie $E(\vec{k})$ für ein fcc-Gitter. (1 Punkt)

(b) In der Nähe des Γ-Punktes kann man eine Taylor-Entwicklung von $E(\vec{k})$ nach $\vec{k}$ durchführen und erhält so einen Zusammenhang mit dem Spektrum freier Elektronen der effektiven Masse m^*. Wie hängt m^* von β und der Gitterkonstanten a ab? (1 Punkt)

(c) Wie groß muss β für $a = 3\,\text{Å}$ sein, damit die effektive Masse gleich der Masse der freien Elektronen ist? (1 Punkt)

(d) Für ein orthorhombisches Gitter ergebe eine Tight-Bindung Rechnung die Bandstruktur $E(\vec{k}) = E_0 - 2\left[\beta_a \cos(k_x a) + \beta_b \cos(k_y b) + \beta_c \cos(k_z c)\right]$, wobei die Längen a, b und c die Abmessungen der Einheitszelle bezeichnen. Berechnen Sie die Komponenten des Vektors der Gruppengeschwindigkeit

$$v_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$$

und zeigen Sie, dass der Tensor der effektiven Masse

$$\left[\mathrm{M}^{-1}(\vec{k})\right]_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_\mu \partial k_\nu}$$

für alle Vektoren $\vec{k}$ diagonal ist. Diskutieren Sie ferner den Spezialfall, dass $\vec{k}$ in einer Umgebung des Zentrums Γ der Brillouin-Zone liegt. (3 Punkte)

10.2 Bandüberlappung

Zeigen Sie, dass für ein eindimensionales System keine Bandüberlappung auftreten kann. (2 Punkte)
Hinweis: Überlegen Sie, welcher qualitative Unterschied sich beim Übergang von einer auf mehrere Dimensionen in der Schrödingergleichung und ihrem Lösungsspektrum ergibt.

10.3 Bloch-Oszillationen

Ein Elektron werde in einem Festkörper mit der Gitterkonstanten a und der Bandstruktur

$$E(k_x) = \frac{\epsilon}{2}[1 - \cos(k_x a)]$$

durch ein konstantes elektrisches Feld $\mathcal{E} = 50\,\text{MV/cm}$ entlang der x-Koordinate beschleunigt. Die Breite des Bandes betrage $\epsilon = 1\,\text{eV}$.

(a) Berechnen Sie die Schwerpunktsgeschwindigkeit des Wellenpakets des Elektrons als Funktion der Zeit unter Vernachlässigung jeglicher Streuprozesse und Dispersionseffekte. (1 Punkt)

(b) Berechnen Sie die Trajektorie des Elektrons im Ortsraum als Funktion der Zeit. Welche Frequenz Ω charakterisiert die Bewegung? (1 Punkt)

(c) Welche Eigenschaften muss eine Bandstruktur aufweisen, die beim gleichen Feld $\mathcal{E}$ zu einer Oszillation mit der doppelten Frequenz $2\,\Omega$ führt? (1 Punkt)