

NORGES TEKNISK-NATURVITENSKAPELIGE UNIVERSITETET
INSTITUTT FOR FYSIKK

Faglig kontakt under eksamen:

Alex Hansen

Tlf. 93649

EKSAMEN I FAG 74436 KVANTETEORIEN FOR FASTE STOFFER

Tirsdag 6. mai, 1997

kl. 0900–1300

Tillatte hjelpebidler: Rottmann: Matematische Formelsammlung

Rottmann: Matematisk formelsamling

Barnett and Cronin: Mathematical Formulae

Godkjent kalkulator

Oppgave 1

I denne oppgaven skal vi studere perturbasjonsteori i et vekselvirkende system av elektroner og fononer. Fonon Hamilton-funksjonen er gitt ved

$$H^f = H_0^f + V_{ef}(t) \quad (1.1)$$

hvor

$$H_0^f = \sum_{\vec{q}} \omega_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^\dagger(t) a_{\vec{q}}(t) \quad (1.2)$$

og

$$V_{ef}(t) = \sum_{\vec{k}, \sigma} \sum_{\vec{q}} M_{\vec{q}} A_{\vec{q}}(t) c_{\vec{k} + \vec{q}, \sigma}^\dagger(t) c_{\vec{k}, \sigma}(t). \quad (1.3)$$

Her er $A_{\vec{q}}(t) = a_{\vec{q}}(t) + a_{-\vec{q}}^\dagger(t)$. $a_{\vec{q}}(t)$ og $a_{-\vec{q}}^\dagger(t)$ er fononannihilasjons og kreasjonsoperatorer. $c_{\vec{k}, \sigma}(t)$ og $c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger(t)$ er ditto for elektronene. Alle operatorene er skrevet i vekselvirkningsbildet. Elektron Hamilton-funksjonen er gitt ved

$$H^e = H_0^e + V_{ee}(t) + V_{ef}(t) \quad (1.4)$$

hvor

$$H_0^e = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger(t) c_{\vec{k}, \sigma}(t) \quad (1.5)$$

og

$$V_{ee}(t) = \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, \sigma, \sigma'} \tilde{V}_0(\vec{q}) c_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^\dagger(t) c_{\vec{k}'-\vec{q}, \sigma'}^\dagger(t) c_{\vec{k}', \sigma'}(t) c_{\vec{k}, \sigma}(t) \quad (1.6)$$

hvor $\tilde{V}_0(\vec{q}) = 4\pi e^2/q^2$ er den Fourier-transformerte til Coulomb-vekselvirkningen, $V_0(\vec{r}) = 4\pi/r$.

- a) Det er en tilsynelatende tidsavhengighet på høyreside av uttrykkene for H_0^f , ligning (1.2), og H_0^e , ligning (1.5). Vis ved eksplisitt regning at denne kansellerer.

Fononpropagatoren er gitt ved

$$D(\vec{q}, t - t') = -i \frac{\langle \phi | \mathcal{T}[A_{\vec{q}}(t) A_{\vec{q}}^\dagger(t') S(\infty, -\infty)] | \phi \rangle}{\langle \phi | S(\infty, -\infty) | \phi \rangle} \quad (1.7)$$

- b) Forklar i ord betydningen av tilstanden $|\phi\rangle$, operatoren $S(\infty, -\infty)$ og matriseelementet $\langle \phi | S(\infty, -\infty) | \phi \rangle$. Gi en fysisk tolkning av $D(\vec{q}, t - t')$.
- c) Den frie fononpropagatoren $D_0(\vec{q}, t - t')$ finnes ved å neglisjere fonon-elektron vekselvirkningene. Vis at den blir

$$D_0(\vec{q}, t) = -i\theta(t)e^{-i\omega_q t} - i\theta(-t)e^{i\omega_q t}. \quad (1.8)$$

- d) Vis videre at den Fouriertransformerte frie fononpropagatoren,

$$D_0(\vec{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt D_0(\vec{q}, t) e^{i\omega t}, \quad (1.9)$$

er gitt ved

$$D_0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\omega - \omega_{\vec{q}} + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_{\vec{q}} - i\delta} = \frac{2\omega_{\vec{q}}}{\omega^2 - \omega_{\vec{q}}^2 + i\eta}. \quad (1.10)$$

Hva er betydningen av de infinitesimale størrelsene $\delta > 0$ og $\eta > 0$? Hva er den fysiske tolkningen av hver av de to leddene i summen i ligning (1.10)?

- e) Tegn opp Feynmandiagrammene som svarer til laveste (2.) og nest laveste (4.) ordens korreksjon til $D_0(\vec{q}, \omega)$ grunnet fonon-elektron vekselvirkningene.
- f) Bruk Feynmanreglene til å skrive ned det algebraiske uttrykket for lavste ordens korreksjon til $D_0(\vec{q}, \omega)$ fra det relevante Feynmandiagrammet funnet i e). Den frie elektron-propagatoren er

$$G_0(\vec{k}, \omega) = \frac{\theta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F)}{\omega - \epsilon_{\vec{k}} + i\delta} + \frac{\theta(\epsilon_F - \epsilon_{\vec{k}})}{\omega - \epsilon_{\vec{k}} - i\delta}. \quad (1.11)$$

Vi oppgir følgende integraler:

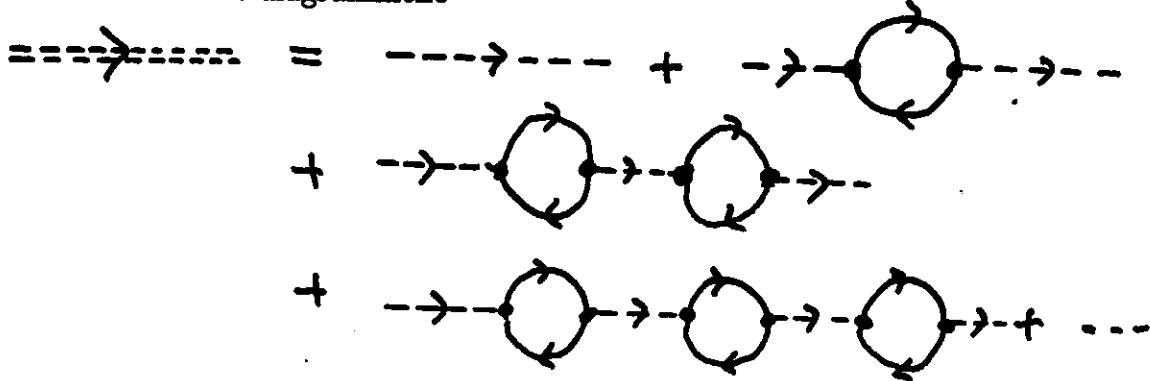
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{x - A + i\delta} \frac{1}{x - B - i\delta} = \frac{-2\pi i}{A - B - 2i\delta}, \quad (1.12)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{x - A - i\delta} \frac{1}{x - B + i\delta} = \frac{2\pi i}{A - B + 2i\delta}, \quad (1.13)$$

og

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{x - A - i\delta} \frac{1}{x - B - i\delta} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{x - A + i\delta} \frac{1}{x - B + i\delta} = 0. \quad (1.14)$$

g) Vis at å summere diagrammene



gir følgende approksimasjon til fonon-propagatoren:

$$D^{-1}(\vec{q}, \omega) = D_0^{-1}(\vec{q}, \omega) - \Pi^{(2)}(\vec{q}, \omega). \quad (1.15)$$

Hva er $\Pi^{(2)}(\vec{q}, \omega)$?

h) Vi vender oss nå til elektron-elektronvekselvirkningen. $\tilde{V}_0(\vec{q}) = 4\pi e^2/q^2$ tolkes som foton-propagatoren. Bruk samme approksimasjon som i g) til å regne ut den *dielektriske konstanten* $\epsilon(\vec{q}, \omega)$, definert som

$$\tilde{V}(\vec{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \quad (1.16)$$

når elektron-fononvekselvirkningene tas hensyn til.

i) Vis at i den statiske grensen, $\omega = 0$, blir den dielektriske konstanten

$$\epsilon(\vec{q}, \omega = 0) = 1 + N(\epsilon_F) \frac{8\pi e^2}{q^2}. \quad (1.17)$$

Her er $N(\epsilon_F)$ tilstandstettheten på Fermi-nivået. Hint: $\sum_{\vec{k}} \rightarrow \int N(\epsilon) d\epsilon \approx N(\epsilon_F) \int d\epsilon$ og $\theta(\epsilon - \epsilon_F) + \theta(\epsilon_F - \epsilon) = 1$. Videre er $\lim_{q \rightarrow 0} [\theta(\epsilon_F - \epsilon_{\vec{k}}) - \theta(\epsilon_F - \epsilon_{\vec{k}+q})]/[\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+q}] = -\delta(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F)$.

j) Gi en fysisk tolkning av

$$\tilde{q} = \sqrt{8\pi e^2 N(\epsilon_F)} \quad (1.18)$$

som forekommer i uttrykket for $\epsilon(\vec{q}, \omega = 0)$, ligning (1.17). Hint: Hva skjer når man Fourier-transformerer $\tilde{V}(\vec{q}) \rightarrow V(\vec{r})$?

Oppgave 2

Det effektive potensialet elektronene utsettes for i en krystall er gitt ved

$$V_{eff}(\vec{q}, \omega) = D_0(\vec{q}, \omega) + \frac{4\pi e^2}{q^2}. \quad (2.1)$$

- a) Vis at uansett hvor sterk den elektrostatiske vekselvirkningen er i forhold til elektronfononvekselvirkningen, finnes det alltid et frekvensområde hvor V_{eff} er tiltrekkende. Hva er fysikken i dette?
- b) Denne tiltrekningen fører til dannelsen av Cooper-par med energi $E = 2\epsilon_F - \Delta$. Hva er grunnen til at det kun er elektroner nær Ferminivået som danner Cooper-par?
- c) Hvorfor domineres Cooper-pardannelsen av elektroner med motsatt \vec{k} -vektor og motsatt spinn σ ?

Vi vender oss nå mot BCS-teorien for superledning. BCS-hamiltonoperatoren er gitt ved

$$H^{BCS} = \sum_{\vec{k}, \sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} + \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} c_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}', \downarrow} c_{-\vec{k}', \uparrow} \quad (2.2)$$

hvor μ er det kjemiske potensial.

- d) Utled middelfeltapproksimasjonen

$$H_{MF}^{BCS} = \sum_{\vec{k}, \sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \mu) c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} - \sum_{\vec{k}} [\Delta_{\vec{k}} c_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger + \Delta_{\vec{k}}^\dagger c_{-\vec{k}, \downarrow} c_{\vec{k}, \uparrow}] + \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger \quad (2.3)$$

hvor

$$b_{\vec{k}} = \langle c_{-\vec{k}, \downarrow} c_{\vec{k}, \uparrow} \rangle \quad (2.4)$$

og

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} b_{\vec{k}'} \quad (2.5)$$

fra (2.2).

Gjennom minimalisering av fri energi basert på middelfelt-hamiltonfunksjonen (2.3) utleder man gapligningen

$$\Delta_{\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}'} V_{\vec{k}, \vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'} \frac{\tanh(\beta E_{\vec{k}}/2)}{2E_{\vec{k}}} \quad (2.6)$$

hvor

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{(\epsilon_{\vec{k}} - \mu)^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2}. \quad (2.7)$$

Ved å løse ligning (2.6), bestemmer man energigapet $\Delta_{\vec{k}}$.

Vi antar nå at matriseelementene $V_{\vec{k}, \vec{k}'} = -V$ når $|\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F| < \omega_D$ og $|\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_F| > \omega_D$ hvor ω_D er Debye-frekvensen til krystallgitteret. Vi antar videre at temperaturen er så lav at det kjemiske potensialet μ er lik Fermi-nivået ϵ_F .

- e) Vis ved hjelp av gapligningen (2.6) at Δ nå er uavhengig av \vec{k} . Videre vis at gapligningen nå kan skrives

$$\frac{1}{VN(\epsilon_F)} = \int_0^{\omega_D} \frac{\tanh(\beta \sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}/2)}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} d\epsilon. \quad (2.8)$$

Husk igjen på overgangen $\sum_{\vec{k}} \rightarrow \int N(\epsilon) d\epsilon \approx N(\epsilon_F) \int d\epsilon$.

- f) Finn den kritiske temperaturen $T_c = 1/\beta_c$ hvorved gapet Δ forsvinner under forutsetning av svak elektron-fononkobling (slik at $\beta_c \omega_D \gg 1$). Hint: $\int_0^\infty dx \ln(x)/\cosh^2(x) = \ln(\pi e^{-\gamma}/4)$, hvor $\gamma = 0.577\dots$ er Eulers konstant.
- g) Vi studerer til slutt hvordan gapet forsvinner når temperaturen nærmer seg den kritiske verdien T_c under oppvarming. Vis at gapet forsvinner som

$$\Delta(T) \sim (T_c - T)^{1/2} \quad (2.9)$$

når $T \rightarrow T_c$ nedenfra.