Prof. Dr. Sabine Klapp
Dr. Judith Lehnert,
Dr. Marten Richter,
Dr. Torben Winzer

10. Übungsblatt – Quantenmechanik II

Abgabe: Do. 21. Januar 2016 bis 8:30 Uhr im Hörsaal

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden **Zwischenschritte** *und* **ausführliche Kommentare** *zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es Punkte! Die Abgabe soll in 3er-Gruppen erfolgen. Bitte geben Sie Ihre Namen, Matrikelnummern und die Übung an!*

Aufgabe 1 (8 Punkte): *Bogoliubov Transformation des mean-field BCS Hamilton-Operators (2+6=8 Punkte)*

Der Bardeen- Cooper-Schrieffer(BCS) Hamilton-Operator ist gegeben durch

$$H_{\mathrm{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad \xi_{-\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}} \quad V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V^{*}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}.$$

(a) Zeigen Sie, dass der mit Hilfe eines mean-field Ansatzes genäherte H_{BCS} gegeben ist durch

$$H_{\mathrm{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\Delta_{\mathrm{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} + \Delta^{*}_{\mathrm{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}) + E^{(0)},$$

wobei $E^{(0)}$ ein Term ist, der von keinem Operator abhängt, und $\Delta_{\mathrm{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle$.

(b) Verwenden Sie nun die Bogoliubov Transformation

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \gamma^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} u^{*}_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -v^{*}_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}}_{\hat{U}_{\mathbf{k}}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix},$$

um den mean-field BCS Hamiltonian zu diagonalisieren. Bestimmen Sie dabei auch $u_{\mathbf{k}}$ und $v_{\mathbf{k}}$. Für die Operatoren $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}$ gelten die kanonischen Antikommutatorrelationen, also $[\gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}'\sigma'}]_{+} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\sigma\sigma'}$ und $[\gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}]_{+} = [\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}'\sigma'}]_{+} = 0$. Zeigen Sie zunächst mithilfe der Antikommutatorrelationen, dass $\hat{U}_{\mathbf{k}}$ unitär ist.

Aufgabe 2 (10 Punkte): *Green'sche Funktionen im Tight-Binding-Modell (TBM)*
In dieser Aufgabe soll die Green'sche Funktion für den Tight-Binding-Hamiltonoperator (TBH) betrachtet werden. Der TBH ist ein Beispiel für einen periodischen Hamiltonoperator. TBH bleiben invariant unter Translationen mit einem Vektor $\mathbf{l}$, wobei die Menge $\{\mathbf{l}\}$ ein reguläres Gitter im d-dimensionalen Raum bildet. Der Hamiltonian des TBM ist gegeben durch

$$H = \epsilon_0 \sum_l |l\rangle\langle l| + V \sum_{\langle lm\rangle} |l\rangle\langle m|, \tag{1}$$

mit den Annahmen: (i) Nächste-Nachbar-Kopplung ($\langle\rangle$ markiert dies in den Summen), (ii) $\langle l|m\rangle = \delta_{lm}$.
Die Green'sche Funktion des TBH ist definiert durch

$$\hat{G}(z) = \sum_k \frac{|k\rangle\langle k|}{z - E(\mathbf{k})}, \quad G(l,\, m;\, z) = \langle l|\hat{G}(z)|m\rangle \tag{2}$$

(a) Verifizieren Sie, dass die Eigenfunktionen und die Eigenenergien des TBH

$$|k\rangle = \sum_l c_l |l\rangle = c_0 \sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}}|l\rangle, \quad E(\mathbf{k}) = \epsilon_0 + V \sum_{\langle l\rangle} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{l}} \tag{3}$$

(b) Zeigen Sie, dass für die diagonalen Matrixelemente der Green'schen Funktion des TBH $G(l,\, l;\, z) \underset{z\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{z}$ gilt.

(c) Bestimmen Sie für ein 1D-Gitter die Green'sche Funktion $G^+(l,\, m;\, z)$ (lösen Sie insbesondere die auftretenden Integrale) und zeigen Sie, dass die Zustandsdichte pro Gitterpunkt gegeben ist durch

$$\rho(E) = \frac{\theta\left(B - |E - \epsilon_0|\right)}{\pi\sqrt{B^2 - (E - \epsilon_0)^2}}, \tag{4}$$

wobei $B = 2|V|$. Tipp: Die Substitution $\phi = ka$ mit der Gitterkonstante a und das Lösen in der komplexen Ebene mit $w = e^{\imath\phi}$ mittels Residuenkalküls kann hilfreich sein.