Kolektivní a kooperativní jevy – 3. sada příkladů

1. Střední hodnoty operátorů ve stavu popsaném BCS zkušební funkcí

Vypočtěte níže uvedené střední hodnoty ve stavu zadaném Schriefferovým Ansatzem

$$|\mathrm{BCS}\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}} (u_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} \hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}) \, |\mathrm{vac}\rangle \, ,$$

kde $|\mathrm{vac}\rangle$ je stav bez elektronů.

- obsazení jednotlivých elektronových stavů $\langle \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma} \rangle$
- střední celkový počet elektronů $\langle \hat{N} \rangle$, kde $\hat{N} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\sigma} \hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma}$
- střední kvadratickou odchylku v počtu elektronů $\langle (\hat{N} - \langle \hat{N} \rangle)^2 \rangle$
- střední hodnotu operátoru anihilace páru $\langle c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}\uparrow} \rangle$
- střední hodnotu BCS interakčního členu $\langle \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} \hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} \hat{c}_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} \hat{c}_{\boldsymbol{k}'\uparrow} \rangle$

2. BCS popis supravodivosti vysokoteplotních kuprátových supravodičů

Ve vysokoteplotních kuprátových supravodičích je s velkou pravděpodobností supravodivost způsobena odpudivou interakcí mezi elektrony nesenou antiferomagnetickými spinovými fluktuacemi s charakteristickým vlnovým vektorem $\boldsymbol{Q} = (\pi/a, \pi/a)$. V příkladu se přesvědčíme, že tento scénář vede k párování se symetrií typu d, kdy vzájemný pohyb elektronů v Cooperově páru odpovídá celkovému momentu hybnosti s $l = 2$ namísto $l = 0$, jako tomu je u nejběžnější symetrie typu s. Popis situace si zjednodušíme použitím BCS přiblížení. V rámci něj řešíme rovnici pro supravodivou mezeru při konečné teplotě

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = -\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \, \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{2\sqrt{\xi^2_{\boldsymbol{k}'} + \Delta^2_{\boldsymbol{k}'}}} \, \tanh \frac{\sqrt{\xi^2_{\boldsymbol{k}'} + \Delta^2_{\boldsymbol{k}'}}}{2k_B T} \, .$$

Pro kupráty lze zvolit těsnovazební disperzi elektronů pohybujících se na čtvercové mřížce

$$\xi_{\boldsymbol{k}} = -2t\,(\cos k_x a + \cos k_y a) - 4t' \cos k_x a \, \cos k_y a - \mu$$

s parametry $t = 0.35\,\mathrm{eV}$, $t' = -t/3$ a chemickým potenciálem $\mu = -0.4\,\mathrm{eV}$. Interakci zprostředkované spinovými fluktuacemi odpovídá statický interakční potenciál tvaru

$$V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'} = \frac{V_0}{1 + \Lambda^2 (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}' - \boldsymbol{Q})^2} \, ,$$

který není narozdíl od BCS interakce separabilní, což komplikuje řešení rovnice pro supravodivou mezeru. Použijte tyto hodnoty parametrů potenciálu: vazebná konstanta $V_0 = 4.4\mathrm{eV}$, koherenční délka $\Lambda = 2.35a$.

- Vypočtěte rozložení supravodivé mezery $\Delta(k_x, k_y)$ v Brillouinově zóně při teplotě $T \ll T_c$.
- Stanovte teplotní závislost supravodivé mezery v bodě $(k_x, k_y) = (\pi/a, 0)$ v intervalu 0 až 200 K.

Doporučení k numerickému řešení: Čtvercovou Brillouinovu zónu pokryjte pravoúhlou sítí s $N \times N$ uzly. Rovnici pro supravodivou mezeru řešte iterační metodou, kdy novou aproximaci $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ získáte vyčíslením pravé strany rovnice s použitím předchozí aproximace $\Delta_{\boldsymbol{k}}$. Iterace je třeba provádět tak dlouho, dokud se $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ neustálí. Jako výchozí $\Delta_{\boldsymbol{k}}$ vezměte $\frac{1}{2}\Delta_0(\cos k_x - \cos k_y)$ s malou amplitudou Δ_0, např. 0.1 meV.

Potřebný počet iterací se pohybuje řádově v jednotkách až desítkách pro teploty dostatečně hluboko pod T_c a dostatečně vysoko nad T_c, ale blížíme-li se k T_c, počet iterací strmě narůstá. K posouzení konvergence postupu s rostoucím N porovnejte výsledky pro $N = 64$ (bude nedostatečné), $N = 128$ (již dostatečné) a $N = 256$ (pro ověření dostatečnosti předchozího N).
Závěrečná poznámka: V rovnici pro supravodivou mezeru není použit "cut-off", tedy omezení interakce na oblast okolo Fermiho energie. V klasickém BCS případě je roven $\hbar\omega_D$, v našem případě energii tzv. rezonančního spinového módu, $\hbar\omega_0 = 40\,\mathrm{meV}$ pro optimálně dopované $\mathrm{YBa_2Cu_3O_{7-\delta}}$. Zavedení tohoto omezení by zvýšilo potřebné N a přineslo další komplikace, proto jej pro jednoduchost vynecháme.

3. Rozměry Cooperova páru

Stanovte střední kvadratický poloměr Cooperova páru definovaný jako

$$\rho^2 = \frac{\int r^2 |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \, \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}}{\int |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \, \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}}$$

pomocí koeficientů $g_{\boldsymbol{k}}$ vystupujících ve výrazu $|\psi\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow} |F\rangle$. Dále s využitím řešení z přednášky odvoďte

$$\rho = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\hbar v_F}{E} \ ,$$

kde E je vazebná energie páru.

4. Meissnerův-Ochsenfeldův jev

Uvažujme o supravodiči ve statickém magnetickém poli daném vektorovým potenciálem $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{q}} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$. Interakce s magnetickým polem přináší dodatečný člen v hamiltoniánu

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = \frac{e}{2m} \sum_i \left[\hat{\boldsymbol{p}}_i \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i) + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i) \cdot \hat{\boldsymbol{p}}_i \right] \ .$$

Stanovíme paramagnetickou proudovou hustotu v supravodiči způsobenou magnetickým polem. Příslušný operátor je

$$\hat{\boldsymbol{j}}_p(\boldsymbol{r}) = -\frac{e}{2m} \sum_i \left[\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)\, \hat{\boldsymbol{p}}_i + \hat{\boldsymbol{p}}_i\, \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) \right] \ .$$

Nejprve ukažte, že ve formalismu druhého kvantování jsou interakční hamiltonián a Fourierova složka operátoru paramagnetické proudové hustoty vyjádřeny jako

$$\hat{H}_{\mathrm{int}} = \frac{e\hbar}{m} \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{a}_{\boldsymbol{q}} \; c^\dagger_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} \qquad \text{a} \qquad \hat{\boldsymbol{j}}_p(\boldsymbol{q}) = -\frac{e\hbar}{m} \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \left(\boldsymbol{k} - \frac{\boldsymbol{q}}{2} \right) c^\dagger_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\sigma} c_{\boldsymbol{k}\sigma} \ .$$

Stavový vektor $|\Psi_A\rangle$ supravodiče ve slabém magnetickém poli získáme poruchovým rozvojem

$$|\Psi_A\rangle = |\Psi_0\rangle - \sum_n \frac{\langle n|\hat{H}_{\mathrm{int}}|\Psi_0\rangle}{E_n - E_0} \; |n\rangle \ ,$$

kde $|\Psi_0\rangle$ je základní stav supravodiče bez přítomnosti magnetického pole a n probíhá excitované stavy. Vypočtěte střední hodnotu

$$\boldsymbol{j}_p(\boldsymbol{q}) = \langle \Psi_A | \hat{\boldsymbol{j}}_p(\boldsymbol{q}) | \Psi_A \rangle$$

a přesvědčte se, že $\boldsymbol{j}_p(\boldsymbol{q}) \to 0$ pro $\boldsymbol{q} \to 0$, což dává Meissnerův-Ochsenfeldův jev.